

Formation en modélisation hydrogéologique

Formation professionnelle dispensée à
l'Université de Liège
05 - 16 septembre 2022

Module n°2 : Méthodologie générale et introduction à la modélisation

Prof A. Dassargues

Université de Liège, Département ArGEnCo
Geo³-Hydrogéologie et Géologie de l'Environnement



Un modèle ?

- *un modèle est un moyen ou un outil pour simuler la réalité sous une forme simplifiée*
- *la description mathématique du processus physique d'écoulement d'eau souterraine dans la zone saturée peut déjà être considérée comme un modèle mathématique*
- *un modèle mathématique peut être résolu analytiquement ou numériquement*

Méthodologie et introduction à la modélisation hydrogéologie

PRINCIPES DE LA MODELISATION

ETAPES DE LA MODELISATION

Buts poursuivis

Modèle conceptuel

Modèle mathématique

Modèle numérique

Entrée des données – Implémentation

Estimation des paramètres - Calibration

Validation

Etude de sensibilité

Exploitation du modèle – Simulations

Analyse des résultats par rapport à la question posée

Rédaction d'un rapport structuré

TERMINOLOGIE/DEFINITIONS DE DIFFERENTS MODELES

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

3

Pourquoi un modèle ?

Au préalable, des questions essentielles doivent être évoquées et posées :

- **Le modèle sera-t-il utilisé à des fins de prévisions, d'interprétation ou d'exercice ?**
- **A quelles questions essayons-nous de répondre via le modèle ?**
- **N'existe-t-il pas une meilleure manière de répondre aux questions posées ?**
- **Ne peut-on se contenter d'un modèle analytique au lieu d'un modèle numérique ?**
- **...**

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

4

Durant toutes les étapes de la construction d'un modèle il faut avoir à l'esprit les recommandations suivantes :

- ***il doit permettre une représentation physiquement acceptable des différents processus qui sont importants pour le problème étudié dans le domaine considéré;***
- ***il faut que les résultats soient utilisables.***

➔ données en quantité et qualité suffisantes sont nécessaires

Les différentes étapes de la construction d'un modèle sont les suivantes:

- ***la définition des buts poursuivis par la modélisation;***
- ***le modèle conceptuel;***
- ***le modèle mathématique;***
- ***le modèle numérique, le développement ou le choix d'un programme de calcul;***
- ***l'entrée des données ou l'implémentation;***
- ***la calibration;***
- ***la validation;***
- ***l'étude de sensibilité;***
- ***l'application du modèle;***
- ***l'analyse des résultats par rapport à la question posée;***
- ***la rédaction d'un rapport structuré.***

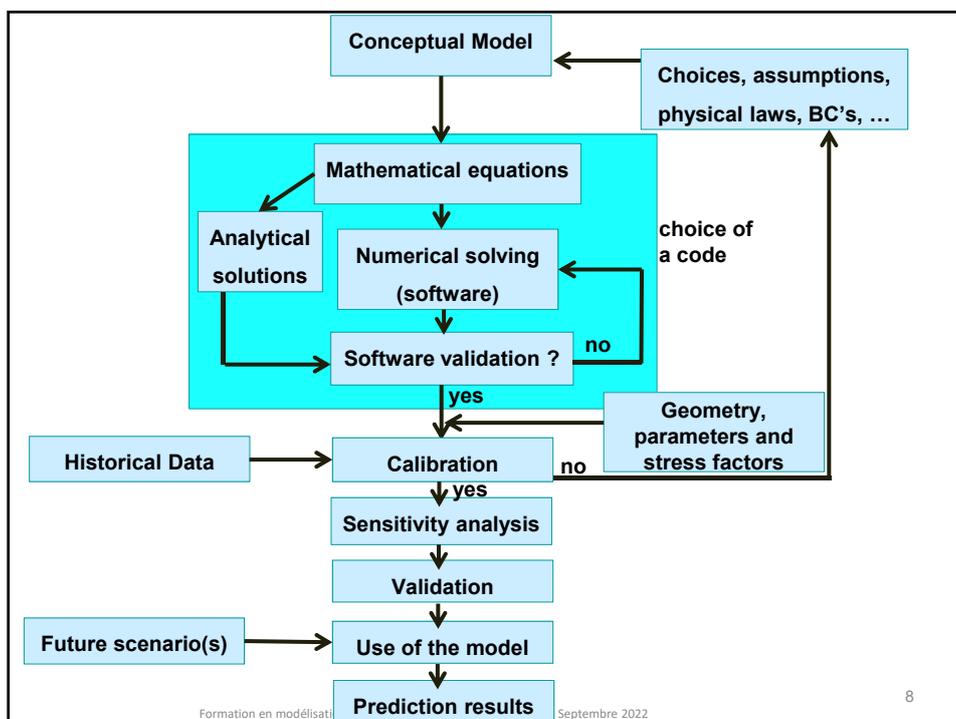
Buts poursuivis

Sur base du problème hydrogéologique, les questions (pour lesquelles des réponses sont attendues) doivent être clairement énoncées:

- la prévision du comportement d'une nappe aquifère en réponse à une nouvelle sollicitation de pompage, drainage, captage, infiltration, pollution, etc.;
- l'accès à de nouvelles informations afin de répondre à des obligations légales relatives à la gestion de l'eau;
- l'acquisition d'une meilleure compréhension du système aquifère en relation avec l'hydrogéologie, l'hydrogéochimie, ou la géologie;
- l'optimisation du réseau de mesures;
- l'optimisation de variantes d'assainissement et des essais et mesures additionnels;
- etc.

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

7



Formation en modélisati

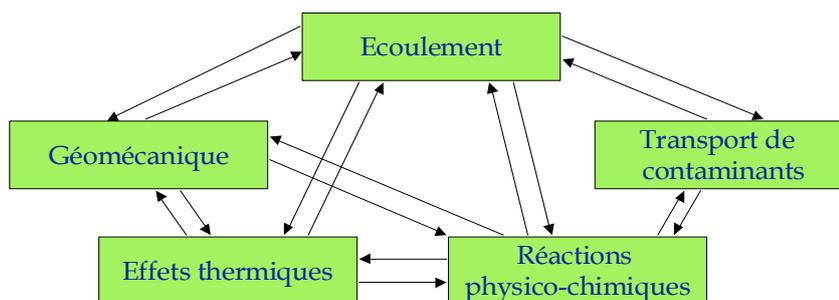
Septembre 2022

8

Modèle conceptuel

... la manière dont on traduit ou représente la réalité dans le modèle

➔ attention aux processus couplés



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

9

Modèle conceptuel (2)

La conceptualisation d'un problème hydrogéologique est l'étape fondamentale consistant à choisir les hypothèses de calcul :

- **niveau d'échelle;**
- **analyse en régime permanent ou transitoire;**
- **dimensionnalité du modèle: 1D, 2D vertical, 2D horizontal, quasi-3D, 3D;**
- **géométrie des frontières, types de conditions à y spécifier (cfr chapitres suivants);**
- **types de matériaux géologiques dont est composé le domaine;**
- **homogénéité/hétérogénéité, isotropie/anisotropie, déformabilité des matériaux;**
- ...

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

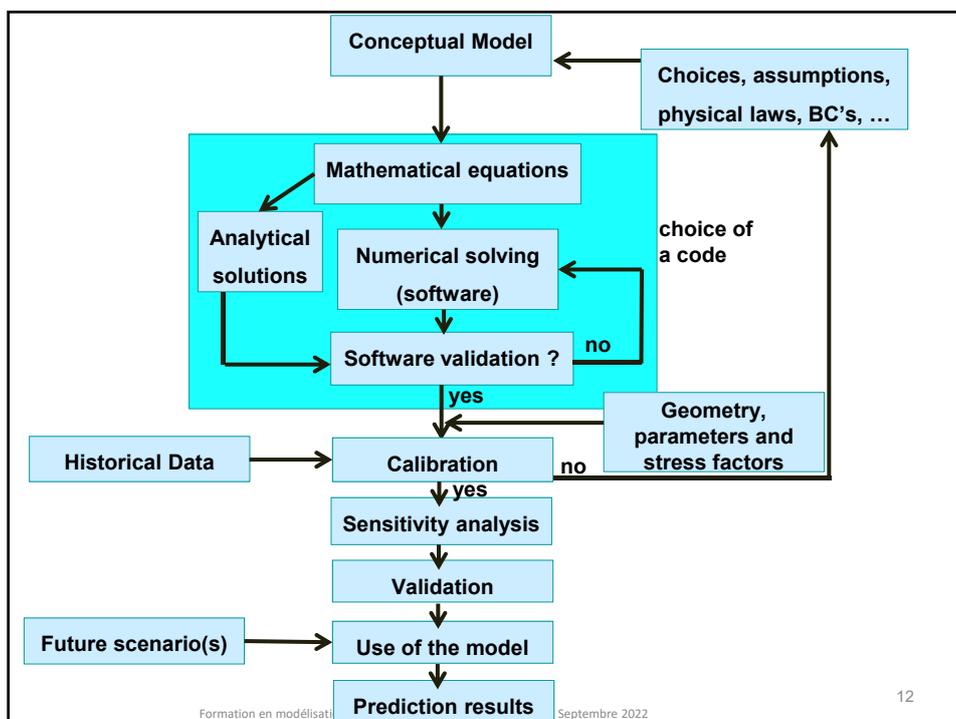
10

Modèle conceptuel (3)

- *nombre et type de phases et de fluides + leurs propriétés*
- *différents composés chimiques impliqués;*
- *mécanismes de transport à l'intérieur du domaine;*
- *possibilités d'échange de composés entre phases;*
- *régimes d'écoulement des fluides impliqués;*
- *conditions isothermes ou non-isothermes;*
- *prise en compte ou non d'une surface libre;*
- *variables d'état considérées, EVR considérés;*
- *présence/absence de sources ou disparitions de fluides ou de polluants à l'intérieur du domaine, leur répartition spatiale et leur variation temporelle;*
- *processus chimiques, physiques ou biologiques;*
- *conditions initiales à l'intérieur du domaine;*
- ...

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

11



Formation en modélisati

Septembre 2022

12

Modèle mathématique

Equations mathématiques décrivant :

- **les processus,**
- **les propriétés variables des fluides concernés (équations d'état),**
- **la géométrie du domaine étudié,**
- **les éléments reprenant les sollicitations, les conditions aux frontières, etc.**

Si les processus à simuler impliquent en plus des aspects physiques, chimiques, thermiques, ou géomécaniques, il faut en tenir compte en introduisant les équations respectives des processus concernés et des équations d'état des variables impliquées.

Développement et choix d'un programme de calcul

Les méthodes analytiques ne sont pas applicables pour les raisons suivantes:

- **les conditions aux frontières sont souvent irrégulières et variables dans l'espace et le temps;**
- **le milieu géologique est hétérogène, des valeurs différentes des paramètres doivent être prises en compte dans différentes zones du domaine;**
- **le couplage entre différents processus induit des non linéarités importantes (variations en fonction de la variable principale du problème) de certains paramètres;**
- **les changements en fonction du temps des sollicitations réparties dans le domaine à simuler.**

Développement et choix d'un programme de calcul (2)

Les techniques numériques utilisées ont pour point commun:

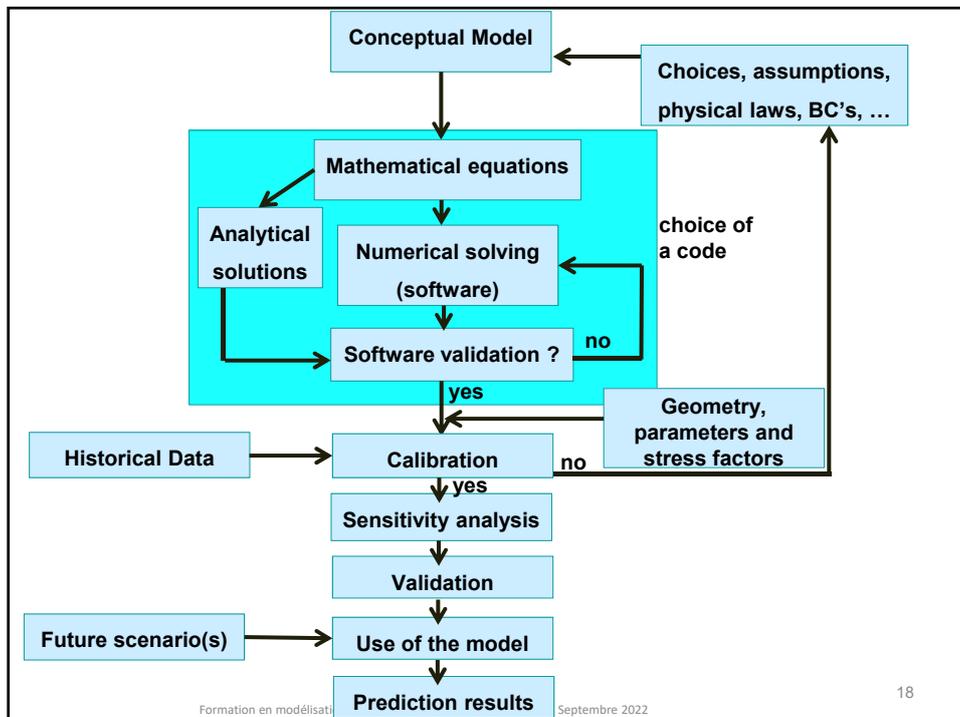
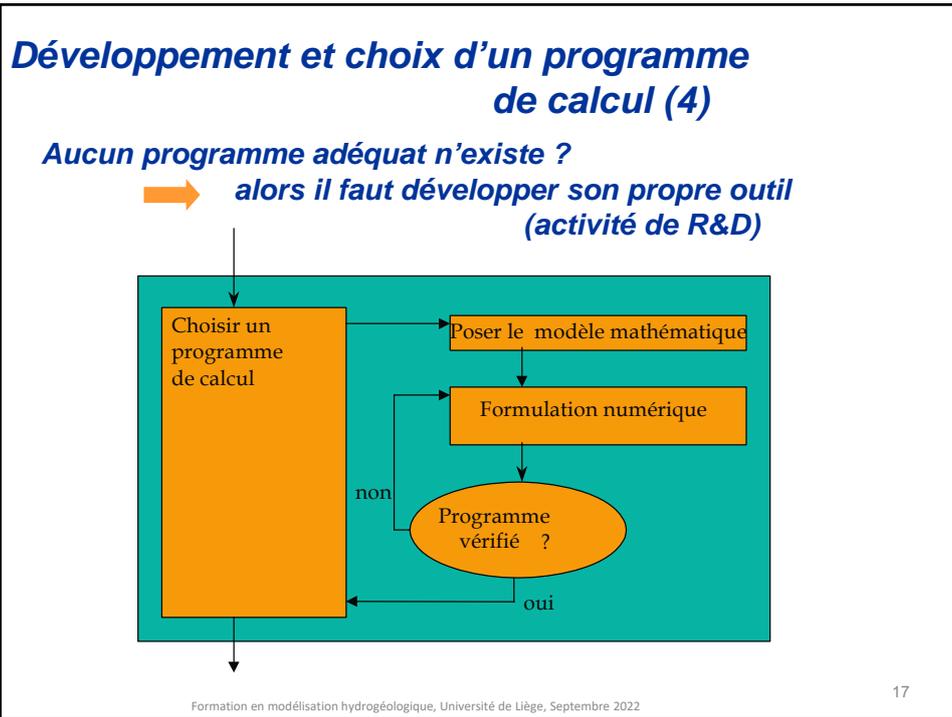
- ➔ **La zone d'étude est représentée par un maillage d'éléments ou de cellules auxquels sont associés des point nodaux (ou nœuds). A l'intérieur de ces sous-domaines le milieu est supposé homogène.**
- ➔ **On remplace une variable continue par une variable discrète (la solution est recherchée en des points discrets du domaine spatio-temporel).**
- ➔ **Les équations aux dérivées partielles sont remplacées, in fine, par un système d'équations algébriques écrites en fonction des variables d'état comme inconnues. La solution du problème est obtenue pour le "set" spécifié de valeurs des paramètres.**

Développement et choix d'un programme de calcul (3)

Il existe actuellement de nombreux programmes, ils ont été développés

- ➔ **pour différentes situations d'écoulement et de transport dans les zones saturée et non saturée des milieux souterrains**
- ➔ **chaque programme est développé pour pouvoir résoudre un certain nombre de situations habituelles**

- Erreurs inhérentes aux modèles:**
- **erreurs sur les mesures (intégrées lors de la calibration)**
 - **erreurs conceptuelles (systématiques)**
 - **erreurs d'approximation**
 - **erreurs numériques**



Implémentation du modèle

Modèle conceptuel → **traduit sous une forme utilisable pour la modélisation:**

- ■ **discretisation spatiale,** → **maillage**
- **discretisation temporelle,** → **pas de temps**
- **conditions aux frontières,**
- **termes de sources (sollicitations),**
- **valeurs initiales de la variable principale,**
- **valeurs initiales pour les variables d'état.**

Données nécessaires:

- **contexte physique et géologique,**
- **contexte hydrogéologique détaillé,**
- **données de transport**

Implémentation du modèle (2)

La bonne connaissance de la géométrie du système à modéliser peut impliquer notamment de disposer des données suivantes :

- ■ **les cartes et coupes géologiques reprenant les répartitions verticale et horizontale des différentes couches et limites du système;**
- **la carte topographique avec la localisation des eaux de surface et des limites topographiques et hydrologiques de surface;**
- **les cartes des contours des courbes de même valeur de la cote de la base des niveaux aquifères et aquitards;**
- **les cartes des courbes d'égale épaisseur des aquifères et des aquitards;**
- **les cartes reprenant la répartition et les épaisseurs des sédiments récents des rivières, lacs, etc.**

Implémentation du modèle (3)

Valeurs et répartition initiale des paramètres hydrogéologiques:

- ➔ ■ *cartes des hauteurs piézométriques dans les différents aquifères concernés;*
- *valeurs et variations des niveaux des eaux souterraines, des eaux de surfaces et des débits;*
- *cartes et coupes reprenant la répartition spatiale des conductivités hydrauliques et/ou des transmissivités;*
- *cartes et coupes reprenant la répartition spatiale du coefficient d'emménagement (spécifique);*
- *valeurs de la perméabilité du fond des rivières;*
- *répartition spatiale et variation temporelle des débits de pompage, de l'évapotranspiration, des interactions avec les eaux de surface, les alimentations, les pertes, etc..*

Implémentation du modèle (4)

Données additionnelles pour le transport:

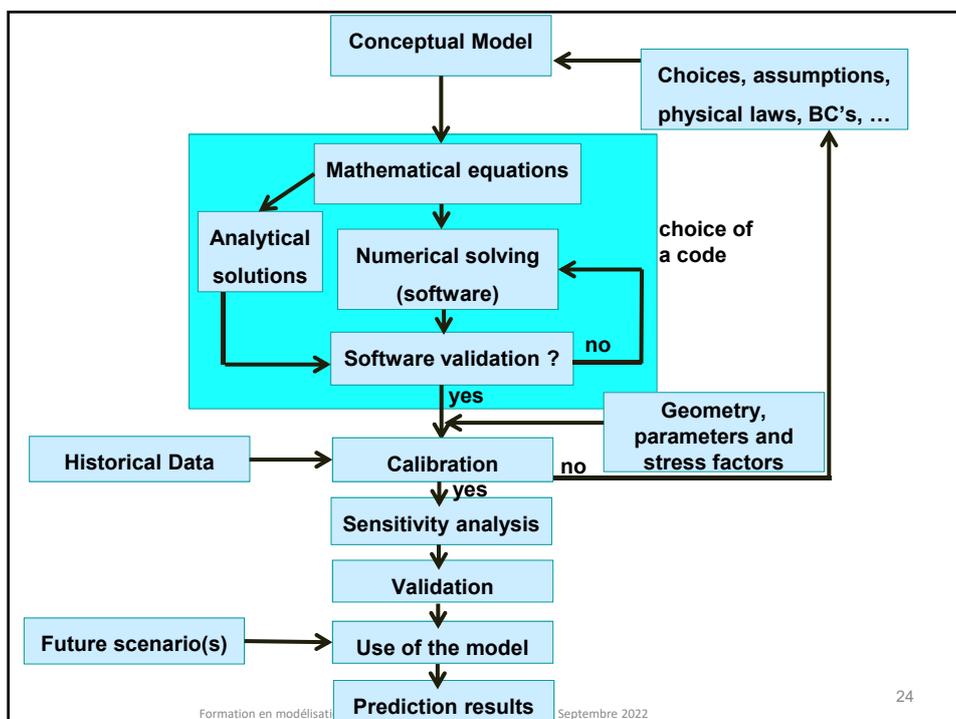
- ➔ ■ *cartes des concentrations dans les différents aquifères concernés;*
- *variation des concentrations en fonction du temps dans différents puits de contrôle;*
- *cartes et coupes représentant la répartition dans l'espace des différents paramètres de transport (porosité effective, dispersivités, constantes de dégradation, facteurs de retard, etc.);*
- *répartition spatiale et temporelle de toutes les sources de pollution (solllicitations).*

Besoins en données: résumé et généralisation

- **géométrie (1D, 2D ou 3D) de la zone à modéliser (géologie, topographie, hydrologie, ...);**
- **valeurs des propriétés du milieu influençant les processus simulés (exemple pour l'écoulement: K et S_s ou T et S);**
- **sollicitations (stress factors) appliquées au système (exemple pour l'écoulement: infiltration, pompages, injections, ...)**
- **données historiques (mesurées) concernant la variable dépendante du problème ou sa dérivée (exemple pour l'écoulement: hauteurs piézométriques mesurées et débits ou flux mesurés)... qui seront utilisées lors de la calibration du modèle (ou résolution du problème inverse).**

23

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022



Formation en modélisati

Septembre 2022

24

Calibration du modèle

Adaptation des paramètres pour trouver ceux qui correspondent à des résultats optimum du modèle (par rapport aux mesures)

➔ *Comment évaluer si le modèle reproduit bien la situation piézométrique mesurée ou les concentrations mesurées (problème de transport) ?*

Différentes étapes :

- *formulation d'une fonction objectif (objective ou subjective);*
- *réalisation d'une étude de sensibilité;*
- *adaptation des paramètres (problème inverse);*
- *validation du modèle sur une autre jeu de données*

Calibration du modèle (2)

1) Fonction objectif

➔ *fonction écrite à partir des différences entre valeurs mesurées et valeurs calculées*

Exemples:

$$F = \sum_{i=1}^n [(c_i - m_i)^2]$$

$$F_1 = \sum_{i=1}^n |c_i - m_i|$$

$$F_2 = \sum_{i=1}^n \sqrt{|c_i - m_i|}$$

$$F_w = \sum_{i=1}^n [w_i (c_i - m_i)^2]$$

Facteurs de pondération pour les données de nature différente

Objectif de l'étude	Critère de performance / Fonction objectif / Fonction de coût
Evolution générale du débit de base	NSE_q
Valeur Max du débit de base	PE_q
Evolution générale des hauteurs piézo	RMS_h
Variations des hauteurs piézo	$HHVE_h$
...	

$$NSE_q = 1 - \frac{\sum_{t=1}^{nt} (q_t^{sim} - q_t^{obs})^2}{\sum_{t=1}^{nt} (q_t^{obs} - \mu^{obs})^2} = 2 \times \frac{\sigma^{sim}}{\sigma^{obs}} \times r_{itm} - \left(\frac{\sigma^{sim}}{\sigma^{obs}} \right)^2 - \left(\frac{\mu^{sim} - \mu^{obs}}{\sigma^{obs}} \right)^2$$

$$RMS_h = \sqrt{\frac{1}{nt} \times \sum_{t=1}^{nt} (h_t^{sim} - h_t^{obs})^2}$$

$$PE_q = \left(\frac{q_{peak}^{sim}}{q_{peak}^{obs}} - 1 \right) \times 100$$

(S. Wildemeersch, PhD, 2012)

$$HHVE_h = \left(\frac{h_{max}^{sim} - h_{min}^{sim}}{h_{max}^{obs} - h_{min}^{obs}} - 1 \right) \times 100$$

27

Calibration du modèle (3)

2) Réalisation d'une étude de sensibilité

- ➔ *l'observation de l'influence obtenue sur les résultats par des changements des valeurs des paramètres*
- ➔ *les résultats peuvent être traités graphiquement pour obtenir une visualisation de la sensibilité du modèle*
- ➔ *l'étude de sensibilité constitue une aide précieuse à l'analyse de la précision des résultats obtenus et pour la construction de scénarios à modéliser*
- ➔ **Remarque: les paramètres auxquels le modèle se montre peu sensible ne fournissent aucune information essentielle au sujet de la précision des résultats**

28

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

Calibration du modèle (4)

3) Adaptation des paramètres

- ➔ ■ *adaptation sur base de conclusions qualitatives déduites d'observations de terrain;*
- *adaptation sur base de l'étude de sensibilité;*
- *adaptation sur base de l'erreur commise (fonction objectif)*
 - ➔ ■ *procédure 'manuelle'*
 - *procédure automatique*

En plus du critère basé sur la valeur de la fonction objectif, des graphiques comparant les valeurs mesurées aux valeurs calculées peuvent être très utiles:

- ➔ ■ *'scatterdiagram' avec les valeurs mesurées en fonction des valeurs calculées aux mêmes points;*
- *variation temporelle de la différence entre valeurs mesurées et calculées;*
- *variations temporelles des valeurs mesurées et calculées*

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

29

Calibration du modèle (5)

4) Validation

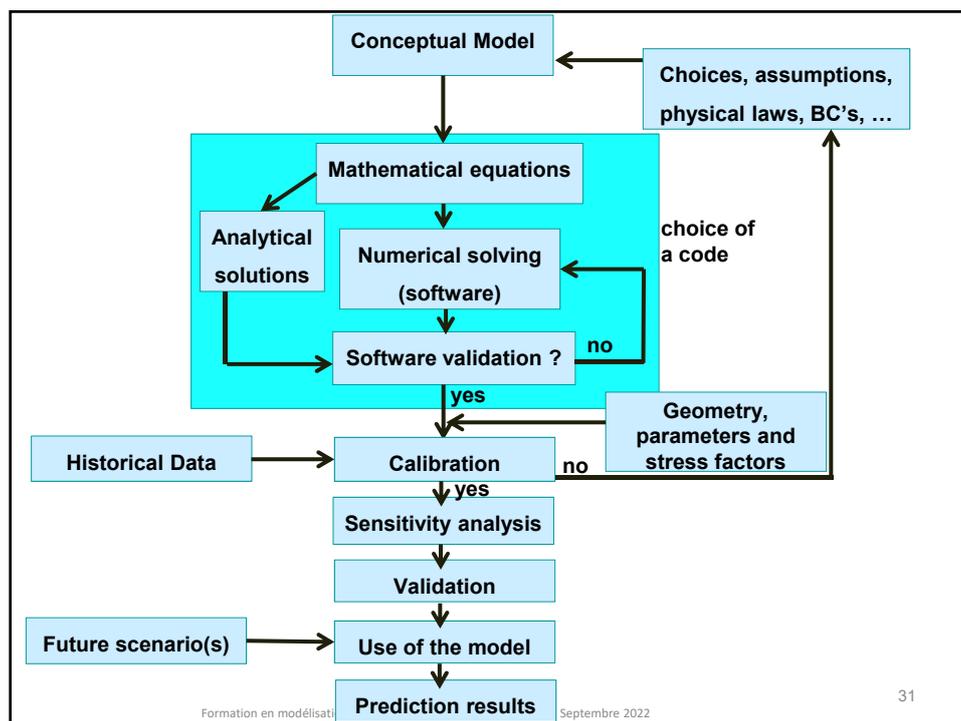
- ➔ *circonstances 'luxueuses':*
 - pour 'validation', le modèle est essayé sur une autre période (non utilisée pour la calibration) et les résultats sont comparés aux mesures*
- ➔ *si cette période est ensuite utilisée pour corriger le modèle, cette validation fait partie, en pratique, de la calibration*

En principe il existe deux possibilités pour valider un modèle :

- *la simulation d'une autre période;*
- *le contrôle par après ('post-audit', 'post-validation') des résultats du modèle par rapport à de nouvelles mesures*

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

30



Applications possibles (exemples):

- *détermination des tendances régionales de l'écoulement souterrain et du transport de contaminants dans l'aquifère concerné en tenant compte des pompages, des infiltrations, des éventuelles interactions avec les eaux de surface, etc. ;*
- *prédiction de l'effet de pompages et captages supplémentaires sur les niveaux piézométriques;*
- *prédiction du mouvement et de la position d'une intrusion d'eaux salées dans les eaux douces;*
- *prédiction de l'effet induit sur la nappe aquifère par l'augmentation de pratiques d'irrigation;*
- *prédiction de l'effet induit sur la nappe aquifère par l'urbanisation du territoire;*

Applications possibles (exemples) (2):

- *prédiction de l'effet induit sur les eaux souterraines pour différents scénarios de changements climatiques;*
- *prédiction de l'effet induit sur les écoulements souterrains et hauteurs piézométriques par l'implantation d'un nouveau canal, de nouveaux fossés de drainage, etc.;*
- *analyse de l'influence multi-annuelle du climat sur les hauteurs piézométriques et distinction entre les effets climatiques et anthropogéniques;*
- *détermination de la répartition géographique des paramètres hydrogéologiques (problème inverse);*
- *optimisation du réseau de mesure pour les eaux souterraines et détermination des points les plus sensibles (en fonction de différentes sollicitations);*
- *adoption d'une gestion adaptée des captages et pompages réalisés dans un système aquifère;*

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

33

Applications possibles (exemples) (3):

- *détermination de l'effet induit par un stockage momentané d'eaux de surface dans le sous-sol;*
- *détermination de l'évolution des concentrations actuelle et future lors de contaminations;*
- *détermination et optimisation de la technique d'assainissement pour la réhabilitation de sites pollués;*
- *identification des mesures à prendre 'in-situ', et concernant le système de mesures;*
- *choix de la localisation (décharges, ...);*
- *détermination des concentrations en différentes substances dans les eaux de sources;*
- *détermination des zones de prévention et de protection autour des captages (sources et pompages).*

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

34

Terminologie/Définitions de différents modèles

Modèles 'boîtes noires' versus modèles physiquement basés et spatialement distribués

➔ ... tout est relatif, car un modèle reste une simplification de la réalité,

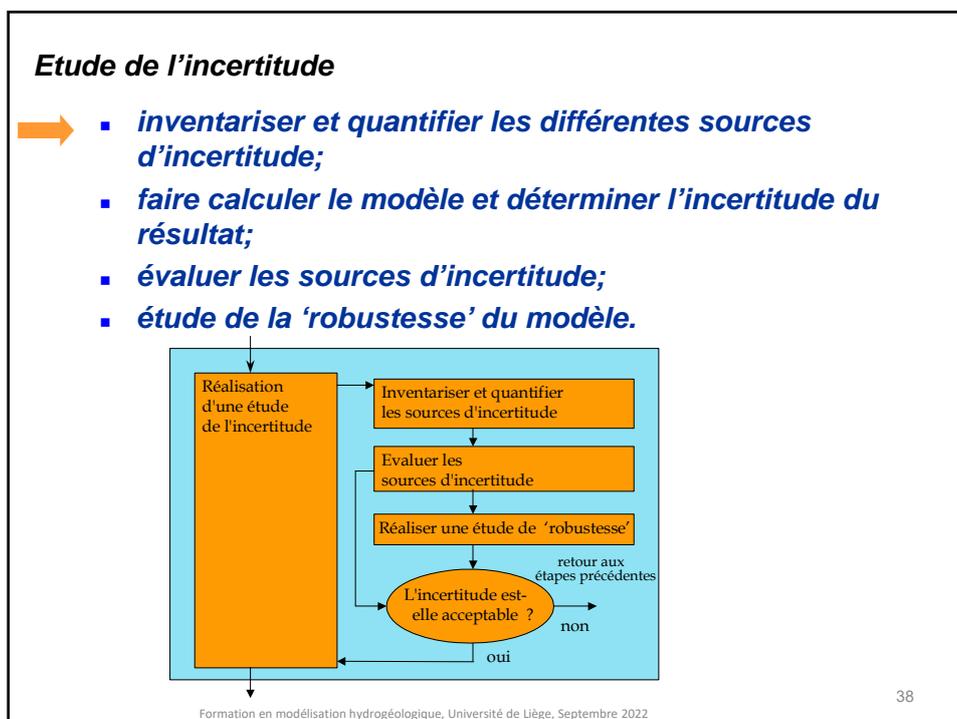
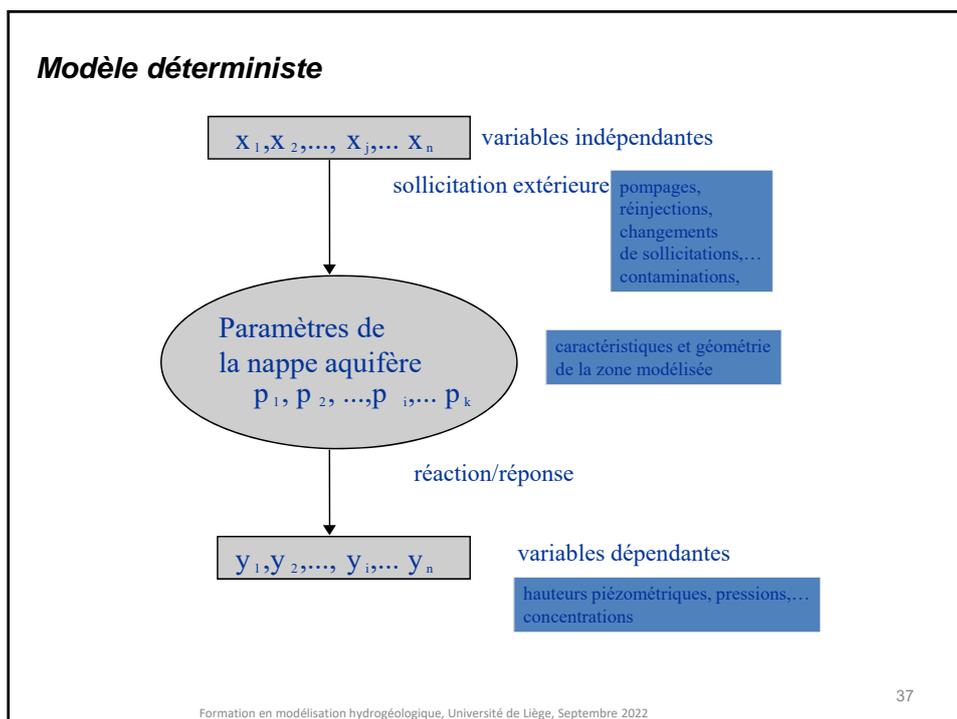
- 'boîte noire'
- 'boîte grise'
- physiquement basé mais pas spatialement distribué;
- spatialement distribué mais pas ou peu physiquement basé;
- spatialement distribué et physiquement basé.

➔ ... modèles ~~'black-box'~~ (sauf peut être pour systèmes karstiques)'

Terminologie/Définitions de différents modèles

Modèles déterministes versus modèles probabilistes, géostatistiques (ou stochastiques) :

- ➔ **Modèle déterministe:** la réponse du système simulé, soumis à chaque jeu de sollicitation, est définie ou prévue de façon purement déterministe (même si le nouveau scénario de sollicitation simulé est en dehors de l'intervalle de sollicitation pour lequel le modèle a été calibré)
- ➔ **Modèle géostatistique:** en plus, les incertitudes des paramètres du modèle, des conditions initiales, des conditions aux frontières, etc.
 - ➔ Résolution combinée (très complexe)
 - ➔ Résolution de n cas équiprobables, puis statistiques sur les résultats pour en inférer le degré de certitude



Modèle prenant en compte le caractère aléatoire de K

- **technique basée sur les méthodes de Monte Carlo**
- **conditionnement sur les données existantes: hard-data et soft-data: simulations conditionnelles**
- **reproduction de la variabilité de la propriété**
- **requiert de grandes ressources CPU à utiliser si possible en parallèle**
- **incertitude des résultats sans tenir compte de l'incertitude du modèle conceptuel adopté**

Terminologie concernant la 'précision' des modèles

Basé sur les processus physiques

Physical consistency is dependent on the conceptual choices to simplify the reality for an efficient modelling

Numériquement cohérent

Numerical consistency is ensured if truncation errors tend to zero for decreasing mesh increments and time steps

Précision

Accuracy = describing the (lowest as possible) modeling errors (truncation and roundoff errors + conceptual and calibration errors)

Résolution

Resolution = the smallest increment or decrement of the considered variable value that can be calculated by the model



EVR

REV concept = considered volume of geological medium for quantifying properties at the appropriate scale (by averaged equivalent values):

a very useful concept that implicitly assumes a continuum and a porous medium

Formation en modélisation hydrogéologique

Formation professionnelle dispensée à
l'Université de Liège
05 - 16 septembre 2022

Module n°3 : Rappels hydrogéologiques et modèle conceptuel

Prof A. Dassargues

Université de Liège, Département ArGEnCo
Geo³-Hydrogéologie et Géologie de l'Environnement



Rappel des équations d'écoulement en milieu saturé

- ***hypothèses et concept d'EVR***
- ***hydrostatique***
- ***porosités***
- ***conductivité hydraulique et loi de Darcy***
- ***transmissivité***
- ***écoulement permanent en milieu poreux saturé***
- ***coefficients d'emmagasinements***
- ***écoulement transitoire en milieu poreux saturé***

Hypothèses et concept d'EVR

➔ l' EVR (REV) est le volume considéré de milieu souterrain pour lequel les propriétés vont être quantifiées (par des valeurs moyennes, équivalentes)

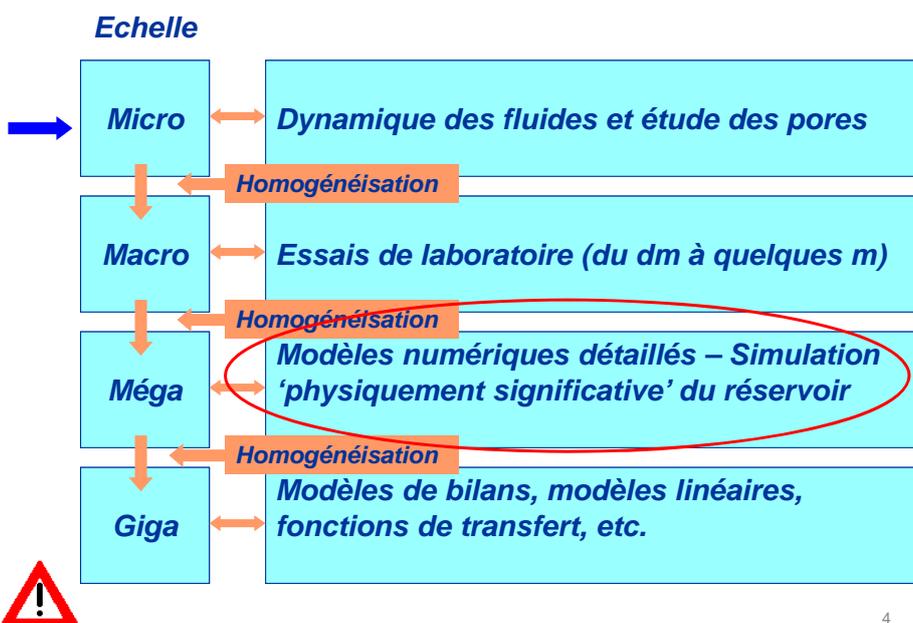
- ➔ ■ assez grand pour être au delà de l'échelle microscopique
- assez petit pour éviter des lissages nuisibles à la représentation du processus



... ce concept sous-entend implicitement que le milieu est continu (et poreux)

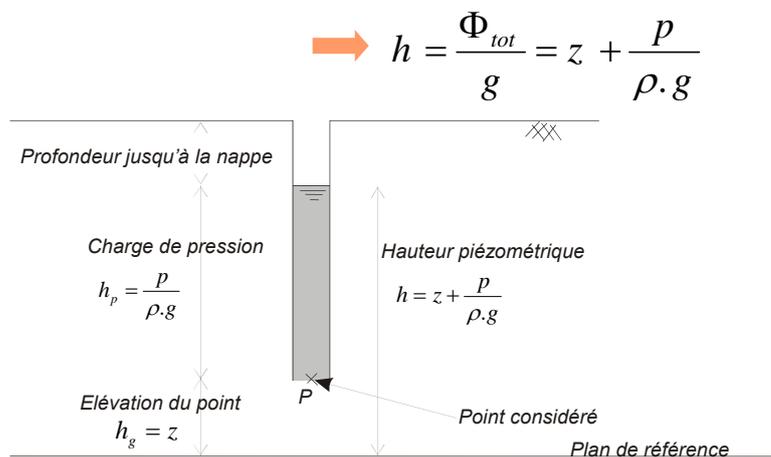
- l' EVR dépend du problème étudié et des objectifs de l'étude
- l' EVR est utilisé pour les écoulements souterrains mais aussi pour le transport de contaminants ... ou tout autre 'quantification' dans un milieu souterrain

Hypothèses, concept d'EVR et échelle du problème



Hydrostatique

→ charge hydraulique, hauteur piézométrique



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

5

Hydrostatique

→ ... lien direct entre hauteur piézométrique h et pression interstitielle p :

$$p = (h - z) \rho \cdot g$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \rho \cdot g \frac{\partial h}{\partial t}$$

→ pour les problèmes d'écoulements souterrains, la pression et/ou la hauteur piézométrique

→ variable principale



Les hauteurs piézométriques sont comparables si et seulement si:

→ même température

→ même contenu en sel

→ si ce n'est pas le cas, ... la densité de l'eau va varier et les mesures de hauteurs piézométriques ne sont plus comparables : il faut une mesure de la salinité et faire une correction

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

6

Conductivité hydraulique et loi de Darcy

... loi expérimentale

→ quantité d'eau par unité de temps à travers un milieu poreux:

$$Q = K.A. \frac{\Delta h}{L}$$

→ **K** le coefficient de perméabilité, la conductivité hydraulique, perméabilité à l'eau (par abus de langage: perméabilité) du milieu poreux (m/s)

→ ... le débit spécifique:

$$q = \frac{Q}{A}$$

en $m^3/(m^2.s)$ donc en m/s

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

7

Conductivité hydraulique et loi de Darcy

Débit spécifique improprement appelé 'vitesse de Darcy'
... il ne s'agit que d'un débit Q divisé par une surface A

cette surface n'est pas la section réelle d'écoulement

→ la section réelle d'écoulement est : $A.n_e$

→ ... pour obtenir une valeur moyenne (sur l' EVR) de la vitesse d'écoulement:

→ $v_e = \frac{q}{n_e} = \frac{K \Delta h}{n_e L}$ m/s 'vitesse d'advection' (vitesse effective)

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

8

Conductivité hydraulique et perméabilité intrinsèque

K

dépend :

- des propriétés du fluide concerné par les écoulements:
 - la viscosité
 - le poids spécifique

- des propriétés du milieu poreux où l'écoulement a lieu:

- granulométrie, forme des grains, répartition et forme des pores, porosité intergranulaire



$$K = \frac{k \cdot \rho \cdot g}{\mu}$$

perméabilité intrinsèque/ perméabilité (m^2)

masse spécifique du fluide (kg/m^3)

accélération de la pesanteur (m/s^2)

viscosité dynamique ($kg/(m.s)$, $N.s/m^2$ ou $Pa.s$)

9

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

Généralisation de la loi de Darcy

... gradient de la hauteur piézométrique:

$$\underline{\text{grad}} h = \left(\frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial h}{\partial y}, \frac{\partial h}{\partial z} \right)$$

dans un EVR isotrope, la conductivité hydraulique est un scalaire

mais K peut prendre différentes valeurs en fonction de la direction considérée

la conductivité hydraulique et la perméabilité intrinsèque

sont donc décrites par des tenseurs: $\underline{\underline{K}}$ et $\underline{\underline{k}}$

$\underline{q} = -\underline{\underline{K}} \underline{\text{grad}} h$ cote du point considéré (par rapport au plan de référence)

$\underline{q} = -\frac{k}{\mu} (\underline{\text{grad}} p + \rho g \underline{\text{grad}} z)$

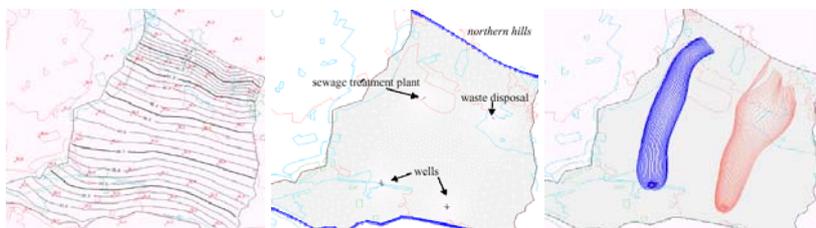
poids spécifique (constant dans l'EVR)

10

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

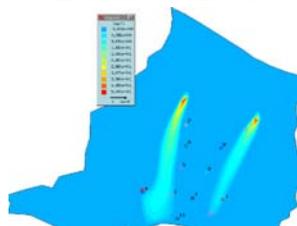
Transport et application de la loi de Darcy

Exemple: calcul d'un temps de transport par advection pure



$$\rightarrow v_e = \frac{q}{n_e} = \frac{K \Delta h}{n_e L} \quad \text{m/s}$$

'vitesse d'advection'
(vitesse effective)



(Feflow ©, 2002)

Transmissivité

... pour un aquifère captif

transmissivité
(m²/s) en un point

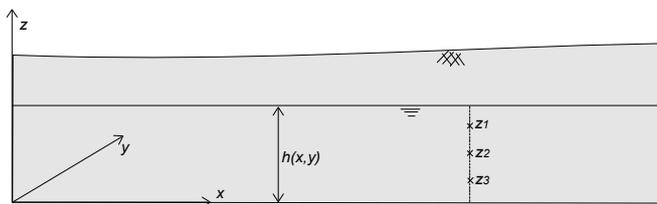
$$\rightarrow T(x, y) = \int_0^{e(x, y)} K(x, y) dz$$

épaisseur de l'aquifère
captif en ce point

valeur moyenne de la
conductivité hydraulique
sur la verticale en ce point

Transmissivité

... pour un aquifère libre



l'épaisseur saturée dans l'aquifère libre au point de coordonnées horizontales x et y

$$T(x, y) = \int_0^{h(x,y)} K(x, y) dz$$
 dépend de la hauteur piézométrique !

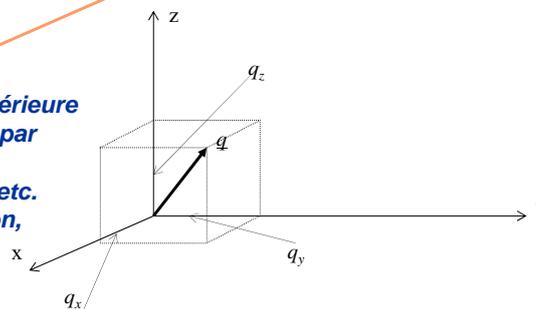
Ecoulement permanent en milieu poreux saturé

... principe de conservation de la masse: entrée = sortie

$$-\text{div}(\rho \underline{q}) - \rho q = 0$$

le débit spécifique (m/s)

débit de sollicitation extérieure ('sink/source flow rate') par unité de volume (s⁻¹), positif pour pompages, etc. et négatif pour infiltration, injection, etc.



$$\text{div} \underline{q} = \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right)$$

Equation d'écoulement en régime permanent

$$- \operatorname{div}(\rho \underline{q}) - \rho q = 0$$

➔ ... en utilisant la loi de Darcy:

$$\operatorname{div}[\rho(\underline{K} \operatorname{grad} h)] - \rho q = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) - q_i = 0$$

h variable principale

$$\operatorname{div} \left(\frac{k}{\mu} (\operatorname{grad} p + \rho g \operatorname{grad} z) \right) - q = 0$$

p variable principale

Coefficient d'emménagement spécifique

... en écoulement transitoire,

variation de l'emménagement en fonction du temps: $\frac{\partial(n\rho)}{\partial t}$

coefficient d'emménagement spécifique
(*'specific storage coefficient'*) (m^{-1})

$$\frac{\partial(n\rho)}{\partial t} = \rho^2 g (\alpha + n\beta_s + n\beta_w) \frac{\partial h}{\partial t} = \rho S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$

compressibilité
volumique du
milieu poreux
(Pa^{-1})

compressibilité
des grains solides
(Pa^{-1})

compressibilité
de l'eau (Pa^{-1})

Coefficient d'emmagasinement spécifique

... souvent, on peut négliger l'influence de la compressibilité de l'eau et de grains solides par rapport à la compressibilité volumique du milieu

$$\rightarrow S_s = \rho g \alpha$$

... cette relation entre la compressibilité volumique et le coefficient d'emmagasinement spécifique, démontre l'existence du couplage direct entre les écoulements non stationnaires et la géomécanique en milieu souterrain compressible

la compressibilité volumique est dépendante de

→ la variation de la contrainte effective

→ la contrainte effective de préconsolidation du milieu

Ecoulement transitoire en milieu saturé

... principe de conservation

de la masse: entrée = sortie + variation d'emmagasinement

$$\rightarrow -\operatorname{div}(\rho \underline{q}) - \rho q = \frac{\partial(n\rho)}{\partial t} = \rho \cdot S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$

$$\rightarrow \operatorname{div}(\underline{K} \operatorname{grad} h) - q = S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \cdot \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) - q_i = S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$

$$\rightarrow \operatorname{div} \left(\frac{k}{\mu} (\operatorname{grad} p + \rho \cdot g \operatorname{grad} z) \right) - q = S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \left(\frac{S_s}{\rho \cdot g} \right) \cdot \frac{\partial p}{\partial t}$$

en conditions
strictement
saturées

Coefficient d'emmagasinement

... le volume d'eau (m³) libéré ou stocké par unité de surface de l'aquifère (m²) pour une variation unitaire de la hauteur piézométrique (m)

➡ ... intégration sur la verticale

$S(x, y) = \int_0^{e(x,y)} S_s(x, y).dz$ **nappe captive**

$S = S_s \cdot e$

➡ $S = n_e + \int_{z_1}^h S_s \cdot dz$ **nappe libre**

la composante la plus importante de l'emmagasinement est due au drainage du milieu poreux qui passe de l'état saturé à non saturé (ou vice-versa)

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022 19

Coefficient d'emmagasinement

➡ $S = n_e + S_s \cdot h$

$S \cong n_e$

plan de référence = base de la formation aquifère

nappe libre nappe captive

gravité

charge

quantité d'eau libérée

drainage expulsion

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022 20

Equations d'écoulement

nappe captive

$$\operatorname{div}(\underline{K} \operatorname{grad} h) - q = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3D, \text{général})$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) - q_i = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3D, \text{forme tensorielle})$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) - q = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3D, \text{anisotropie})$$

$$\rightarrow \operatorname{div}(\underline{T} \operatorname{grad} h) - q' = S \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2D \text{ horizontal})$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial x_i} \left(T_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) - q'_i = S \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2D \text{ horizontal, forme tensorielle})$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \left(T_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) - q' = S \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2D \text{ horizontal, anisotropie})$$

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

21

Equations d'écoulement

nappe libre

... en 3D il est impossible d'écrire les équations d'écoulement sans tenir compte des processus ayant lieu dans la zone non saturée

$$\rightarrow \operatorname{div}(\underline{T}(h) \operatorname{grad} h) - q' = n_e \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2D \text{ horizontal})$$

le tenseur de 2^{ème} ordre de la transmissivité dont les composantes dépendent de la hauteur piézométrique (équation non linéaire)

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial x_i} \left(T_{ij}(h) \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) - q'_i = n_e \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2D \text{ horizontal, forme tensorielle})$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \left(T_{xx}(h) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_{yy}(h) \frac{\partial h}{\partial y} \right) - q' = n_e \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2D \text{ horizontal, anisotropie})$$

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

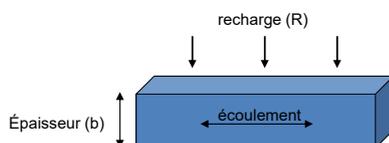
22

Écoulement 2D horizontal – nappe captive

Intègre verticalement l'équation 3D sur l'épaisseur de l'aquifère confiné

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) = S \frac{\partial h}{\partial t} - R + L$$

où **T** : transmissivité [$L^2 T^{-1}$], $K \times$ épaisseur
S : coefficient d'emmaganement [-], $S_s \times$ épaisseur
R : taux de recharge [$L^3 L^{-2} T^{-1}$] = [$L T^{-1}$]
L : taux de drainance [$L T^{-1}$]



Exemple de calcul de drainance

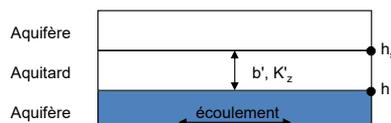
Système multiaquifères

Drainance (écoulement vertical) à travers un aquitard

Loi de Darcy

$$L = - \frac{K'_z (h_s - h)}{b'}$$

où **K'_z** : conductivité hydraulique verticale de l'aquitard
b' : épaisseur aquitard
h_s : charge hydraulique aquifère source
h : charge hydraulique dans aquifère (variable inconnue)



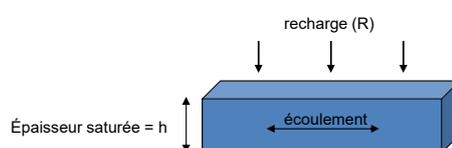
Écoulement 2D horizontal – nappe libre

Intègre verticalement l'équation 3D sur épaisseur de l'aquifère non confiné

Équation non linéaire - Dupuit

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} h \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} h \frac{\partial h}{\partial y} \right) = S_y \frac{\partial h}{\partial t} - R$$

où S_y : porosité de drainage [-]



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

25

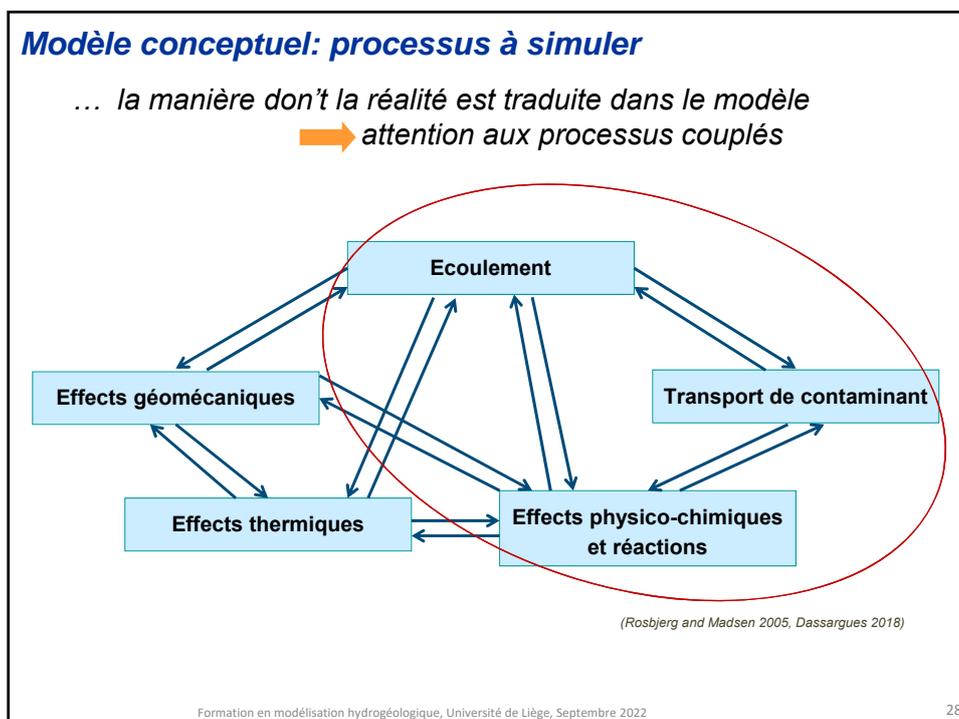
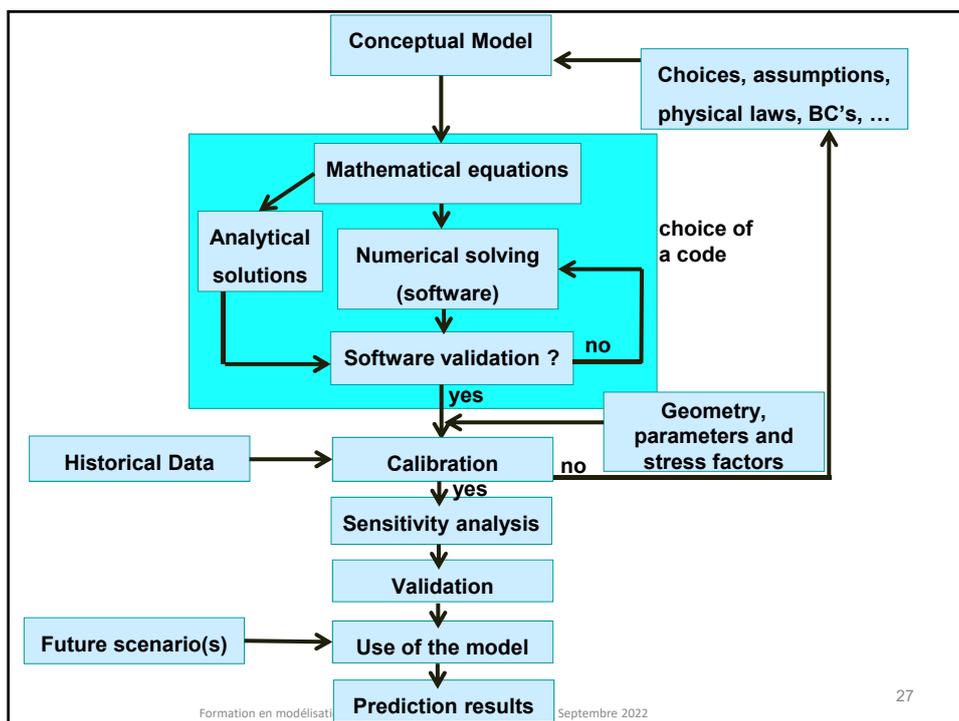
Modèle conceptuel

La conceptualisation d'un problème hydrogéologique est l'étape fondamentale consistant à choisir les hypothèses de calcul :

- processus à simuler
- niveau d'échelle
- analyse en régime permanent ou transitoire
- dimensionnalité du modèle: 1D, 2D vertical, 2D horizontal, quasi-3D, 3D
- géométrie des frontières, types de conditions à y spécifier
- ...

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

26



Modèle conceptuel

– Régime permanent (steady state)

- *cela n'existe pas dans la réalité*
- $\Delta Res = 0$ et $Q_{in} = Q_{out}$
- *quand les hauteurs piezométriques et les flux peuvent être considérés comme stables dans le temps*
- *quand les données transitoires manquent (1ère approximation, ...)*
- *avec données permettant de déduire un 'comportement moyen' du système : R_{mean} , Q_{mean} , H_{mean} ...*
- *pour commencer/initialiser un nouveau système, avant de simuler du transitoire*
- *adopté pour simplifier, considérant des cas 'extrêmes' en étant 'du côté de la sécurité'*

parfois difficile de converger lorsque les données ne sont pas assez réalistes et non-linéarités négligées

→ Simulation en transitoire avec des conditions (stressés) constants avec des pas de temps croissants

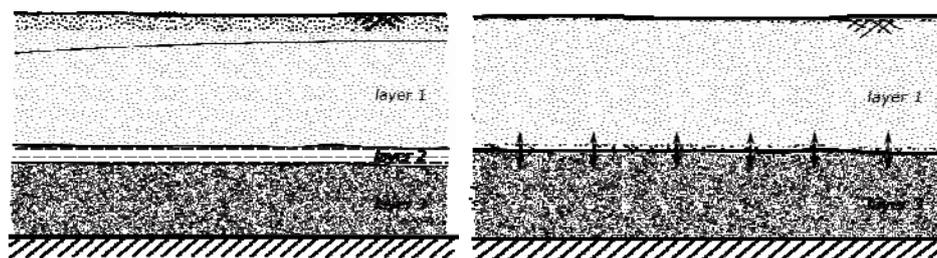
Modèle conceptuel

– Simulation en régime transitoire

- *demande plus de données*
- *prend plus de temps CPU*
- *parfois/souvent nécessaire en fonction du contexte et de la question posée*
 - *caractère transitoire de l'écoulement*
 - *transport transitoire (généralement le cas) dans un écoulement supposé permanent*

Modèle conceptuel**Extension and dimensionnalité**

- *pseudo-3D ou quasi-3D*
 - système multi-couches avec écoulement 2D dans chaque couche
 - écoulement strictement vertical dans les aquitards calculé par application de la loi de Darcy

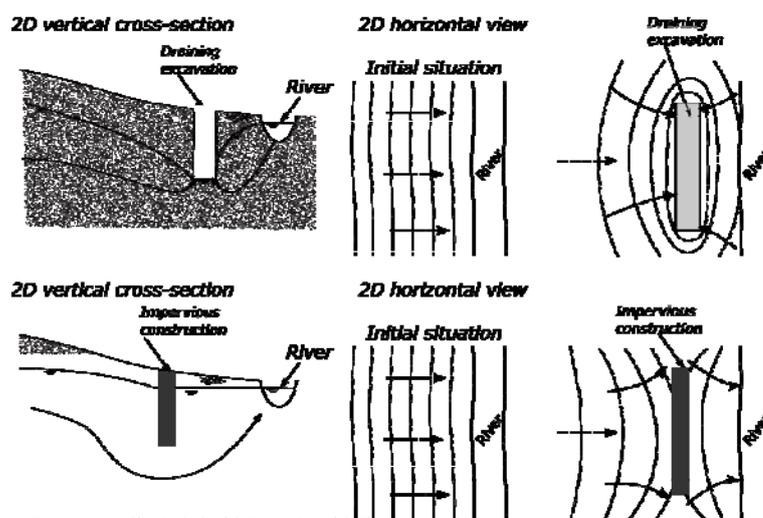


Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

31

Modèle conceptuel**Extension and dimensionnalité**

- modèles verticaux 2D: OK mais écoulement hors du plan est négligé



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

32

Modèle conceptuel

- **Conditions initiales:** valeurs initiales de la variable principale (généralement hauteur piézométrique h) en chaque noeud
 - 1^{ères} valeurs utilisées pour un régime permanent
 - influence le processus de convergence et le temps CPU pour atteindre un régime permanent d'équilibre
 - si la convergence n'est pas idéale, les résultats peuvent être affectés
 - état initial réel du système au temps t_0 pour démarrer un simulation en transitoire
 - si h_i ne sont pas très logiques avec les conditions aux frontières (BC's) et les sollicitations appliquées, alors Δh calculated peut être très bizarre
 - très souvent: on commence avec un régime permanent et on continue avec le transitoire

Conditions aux frontières Modèles d'écoulement

- **Conditions de Dirichlet ou de hauteur piézométrique imposée**
- **Conditions de Neumann ou de flux imposé**
- **Conditions de Cauchy ou de flux dépendant d'une hauteur piézométrique**

Hauteur piézométrique imposée (condition de Dirichlet)

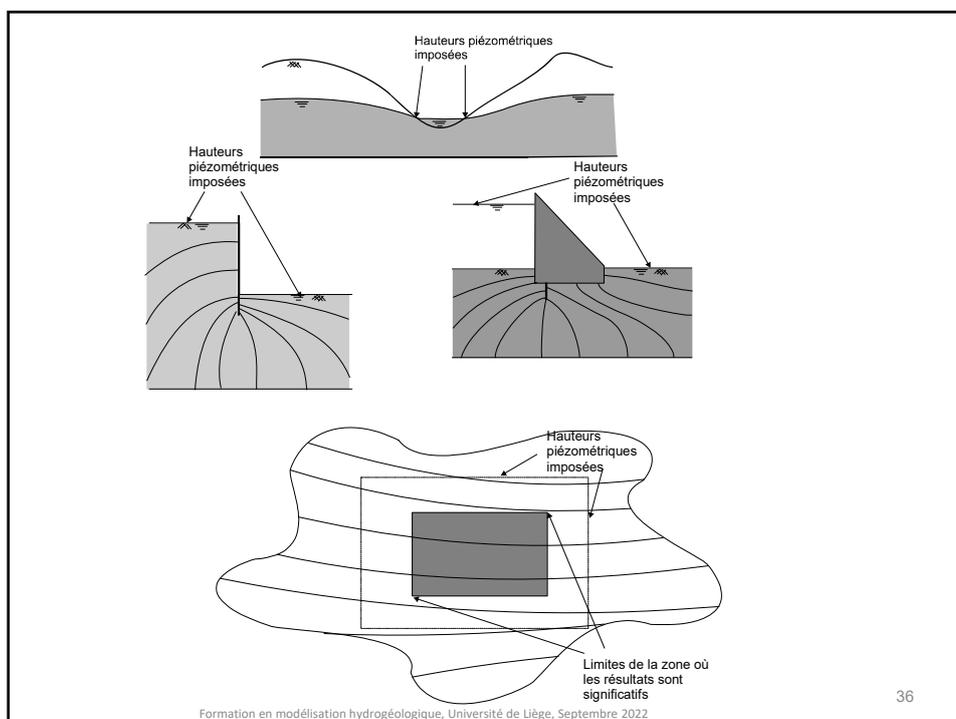
La hauteur piézométrique est spécifiée sur la frontière:

$$h(x, y, z, t) = f'(x, y, z, t)$$

f' peut varier dans l'espace et le temps
(une valeur par nœud concerné et par pas de temps)

le programme calcule alors un flux en chaque nœud concerné

➔ mathématiquement, pour que le problème soit défini de façon univoque il faut minimum une valeur de hauteur piézométrique imposée dans le domaine simulé



Flux imposé (condition de Neumann)

La dérivée première de la hauteur piézométrique est spécifiée sur la frontière concernée:

$$\frac{\partial h}{\partial n}(x, y, z, t) = f''(x, y, z, t)$$

f'' le gradient piézométrique normal à la frontière concernée, sa valeur peut varier dans l'espace et le temps (une valeur par nœud concerné et par pas de temps)
Par application de la loi de Darcy, c'est une manière d'imposer un flux à travers la frontière:

$$-K \cdot \frac{\partial h}{\partial n}(x, y, z, t) = q''(x, y, z, t)$$

q'' : flux imposé à travers la frontière (m/s)

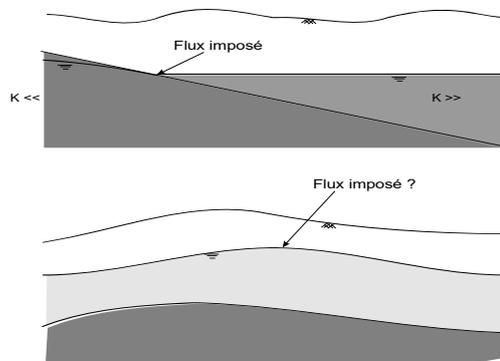
→ cas particulier: $f'' = 0$

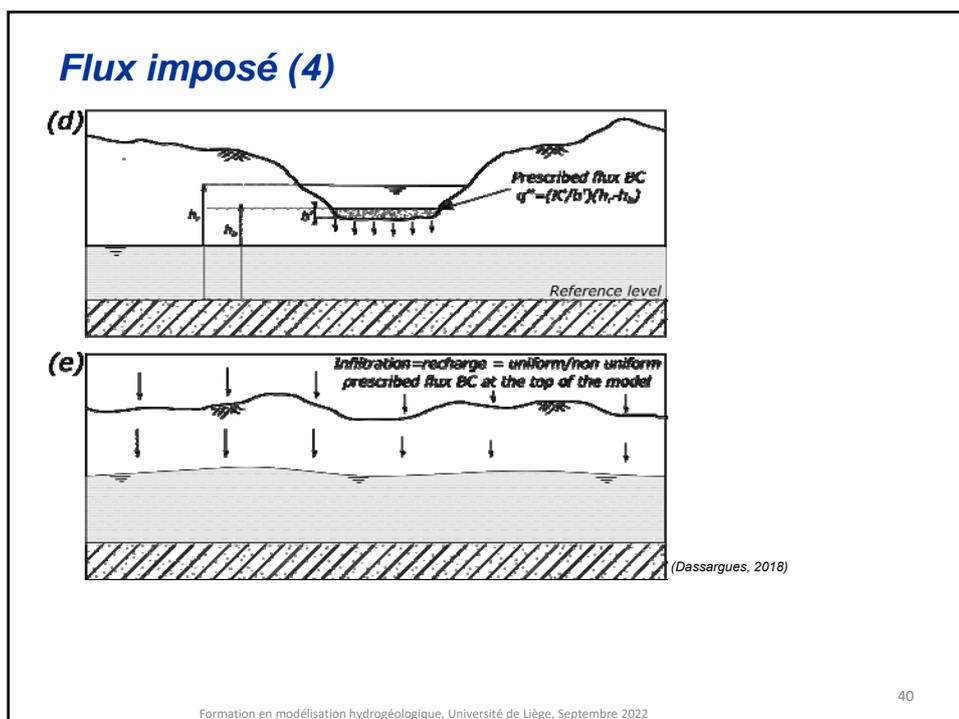
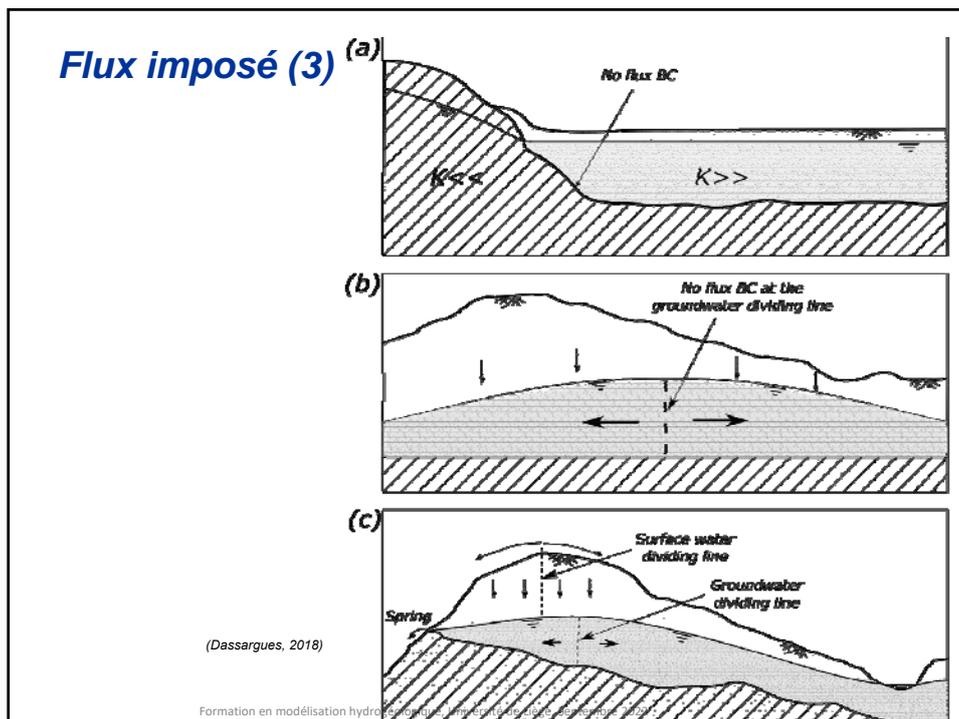
Flux imposé (2)

si le flux est imposé non nul, la condition de débit à travers la surface de la frontière peut s'écrire:

$$\int_S K \cdot \frac{\partial h}{\partial n}(x, y, z, t) \cdot dS = Q(x, y, z, t)$$

Q débit d'eau souterraine à travers la frontière (m³/s)





Flux dépendant de la hauteur piézométrique (condition mixte ou de Fourier/Cauchy)

Une combinaison (relation linéaire) de la hauteur piézométrique et de sa dérivée première est spécifiée sur la frontière:

$$a \cdot \frac{\partial h}{\partial n}(x, y, z, t) + b \cdot h(x, y, z, t) = f'''(x, y, z, t)$$

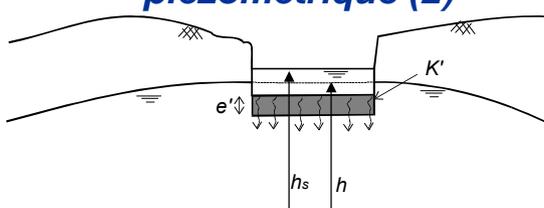
f''' peut varier dans l'espace et dans le temps
(une valeur par nœud concerné et par pas de temps)

- ➔ ■ interactions entre eaux de surface et eaux souterraines
- interactions entre différents aquifères

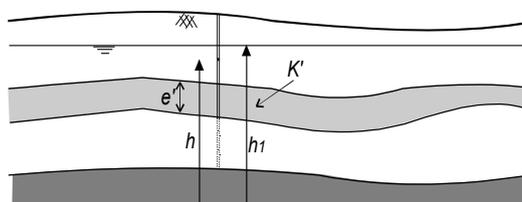
Flux dépendant de la hauteur piézométrique (2)

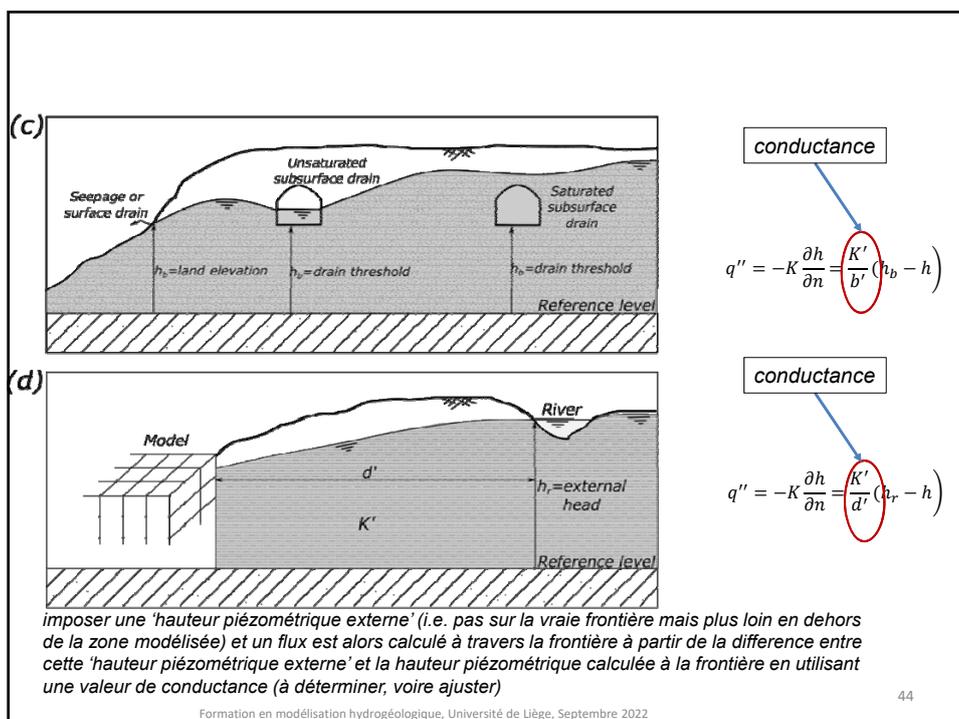
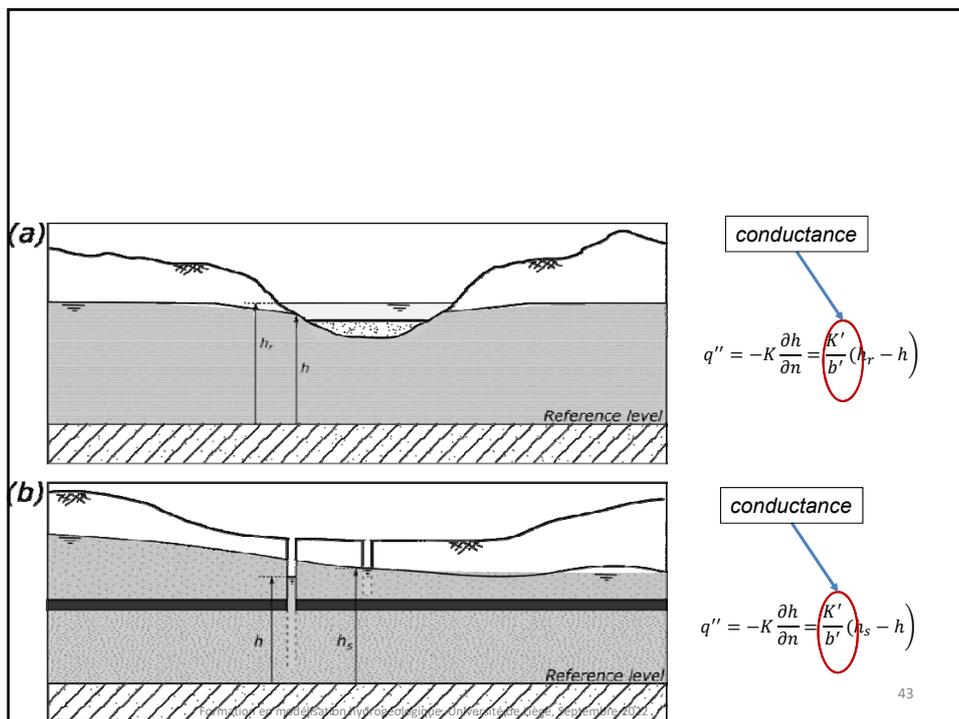
$$q'' = \frac{K'}{e'} (h_s - h)$$

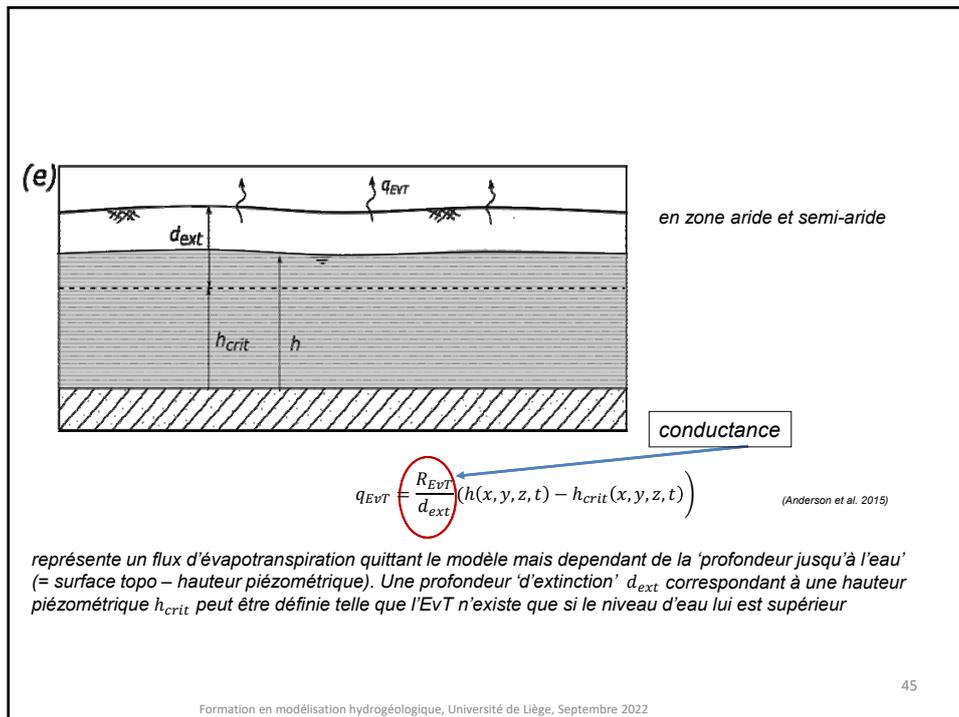
$$-K \cdot \frac{\partial h}{\partial n} + \frac{K'}{e'} \cdot h = \frac{K'}{e'} \cdot h_s$$



$$q'' = \frac{K'}{e'} (h_1 - h)$$







Formation en modélisation hydrogéologique

Formation professionnelle dispensée à
l'Université de Liège
05 - 16 septembre 2022

Module n°4 : Exemples de modèles conceptuels et résolution de l'écoulement

Prof A. Dassargues

Université de Liège, Département ArGEnCo
Geo³-Hydrogéologie et Géologie de l'Environnement



Exemples de modèles conceptuels (écoulements)

- ***nouveau pompage en aquifère crayeux***
- ***pompages brasserie en plaine alluviale***
- ***influence travaux du GC***
- ***modélisation régionale***
- ***modélisation zones de protections***
- ***modélisation intrusion d'eau salée***
- ***modélisation pour géothermie peu profonde***

Méthode des différences finies pour les écoulements en milieu souterrain

ÉCOULEMENT PERMANENT (STATIONNAIRE)

Principes généraux

Valeurs moyennes des paramètres

Recommandations pratiques

ÉCOULEMENT TRANSITOIRE (NON STATIONNAIRE)

Principes généraux

Méthode explicite

Méthode implicite

Méthode de Crank-Nicholson

Méthode de Galerkin

Généralisation du schéma d'intégration temporelle

Écoulement permanent

Principes généraux

Hypothèses:

- *écoulement stationnaire* → $\frac{\partial h}{\partial t} = 0$
- *pas d'infiltration, pas de terme de source/ disparition* → $I = 0 \quad q = 0$
- *homogénéité du milieu* → $T = Cste$
- *problème 2D*

Equation de l'écoulement en régime permanent → $\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = 0$

Principes généraux (2)

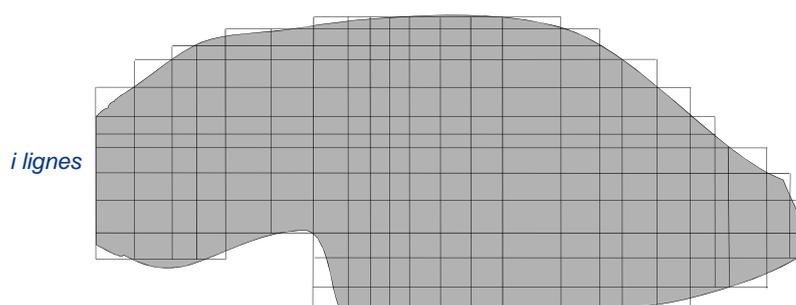
La définition d'une dérivée partielle d'une variable $h(x)$ en fonction de x :

$$\frac{\partial h}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left(\frac{h(x + \Delta x) - h(x)}{\Delta x} \right)$$

- ➔ **discrétisation spatiale par un maillage**
- ➔ **les nœuds sont les points centraux des cellules ('Block Centered Finite Difference method' = BCFD)**
- ➔ **les cellules sont homogènes ... on remplace la variation continue de la variable par une variable discrète définie aux points centraux des cellules**
- ➔ **l'approximation de l'équation différentielle continue est d'autant meilleure que les cellules sont choisies petites**

Principes généraux (3)

j colonnes



- ➔ **les nœuds sont numérotés séquentiellement, des indices i, j et des valeurs de la hauteur piézométrique h_{ij} leurs sont attribuées**

Principes généraux (4)

séries de Taylor pour une fonction quelconque $h(x)$

$$h(x + \Delta x) = h(x) + \Delta x \cdot \frac{\partial h(x)}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 h(x)}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \cdot \frac{\partial^3 h(x)}{\partial x^3} + \dots + \frac{(\Delta x)^n}{n!} \cdot \frac{\partial^n h(x)}{\partial x^n}$$

... pour h_{ij} et le maillage suivant x :

... les termes de 3^{ème} ordre et plus sont négligés

$$h_{i+1,j} = h_{ij} + (x_{i+1} - x_i) \cdot \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \quad \dots \text{pour } \Delta x > 0$$

$$h_{i-1,j} = h_{ij} + (x_{i-1} - x_i) \cdot \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{(x_{i-1} - x_i)^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \quad \dots \text{pour } \Delta x < 0$$

$$\Rightarrow \frac{h_{i+1,j} - h_{ij}}{(x_{i+1} - x_i)} = \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{(x_{i+1} - x_i)}{2} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \quad \text{et} \quad \frac{h_{i-1,j} - h_{ij}}{(x_{i-1} - x_i)} = \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{(x_{i-1} - x_i)}{2} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$$

$$\Rightarrow \frac{(h_{i+1,j} - h_{ij})}{(x_{i+1} - x_i)} + \frac{(h_{i-1,j} - h_{ij})}{(x_i - x_{i-1})} = \frac{1}{2} (x_{i+1} - x_{i-1}) \cdot \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$$

Principes généraux (5)

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = \frac{2}{(x_{i+1} - x_{i-1})} \left\{ \frac{h_{i+1,j}}{(x_{i+1} - x_i)} - \left(\frac{1}{(x_{i+1} - x_i)} + \frac{1}{(x_i - x_{i-1})} \right) h_{ij} + \frac{h_{i-1,j}}{(x_i - x_{i-1})} \right\}$$

Si $(x_{i-1} - x_i) = \Delta x = (x_{i+1} - x_i)$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = \frac{h_{i+1,j} - 2 \cdot h_{ij} + h_{i-1,j}}{(\Delta x)^2}$$

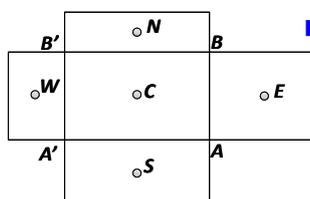
$$\Rightarrow \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = \frac{h_{i,j+1} - 2 \cdot h_{ij} + h_{i,j-1}}{(\Delta y)^2}$$

Si $\Delta x = \Delta y = \Delta m = Cste$

$$\Rightarrow T \cdot \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) = \frac{T}{(\Delta m)^2} \cdot (h_{i+1,j} + h_{i-1,j} + h_{i,j+1} + h_{i,j-1} - 4h_{ij}) = 0$$

$$\Rightarrow h_{ij} = \frac{1}{4} \cdot (h_{i+1,j} + h_{i-1,j} + h_{i,j+1} + h_{i,j-1})$$

Généralisation



$$\int_{AB} T_x \frac{\partial h}{\partial x} dy + \int_{BB'} T_y \frac{\partial h}{\partial y} dx +$$

$$\int_{B'A'} T_x \frac{\partial h}{\partial x} dy + \int_{A'A} T_y \frac{\partial h}{\partial y} dx = Q_C$$

$$T_{xEC} \left(\frac{h_E - h_C}{x_E - x_C} \right) (y_B - y_A) + T_{yNC} \left(\frac{h_N - h_C}{y_N - y_C} \right) (x_B - x_{B'})$$

$$+ T_{xWC} \left(\frac{h_W - h_C}{x_W - x_C} \right) (y_{B'} - y_{A'}) + T_{ySC} \left(\frac{h_S - h_C}{y_S - y_C} \right) (x_A - x_{A'}) = Q_C$$

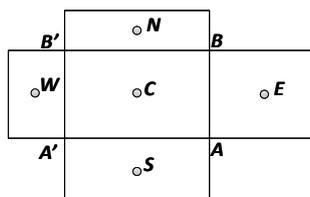
... si cellules rectangulaires : $\Delta x = a$ et $\Delta y = b$

$$\Rightarrow T_{xEC} \frac{b}{a} (h_E - h_C) + T_{yNC} \frac{a}{b} (h_N - h_C) + T_{xWC} \frac{b}{a} (h_W - h_C) + T_{ySC} \frac{a}{b} (h_S - h_C) = Q_C$$

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

9

Généralisation



$$T_{xEC} \frac{b}{a} (h_E - h_C) + T_{yNC} \frac{a}{b} (h_N - h_C) + T_{xWC} \frac{b}{a} (h_W - h_C) + T_{ySC} \frac{a}{b} (h_S - h_C) = Q_C$$

➔ un rapport de maximum 1/10 pour les dimensions des cellules rectangulaires (pour de bonnes conditions de calcul)

... si $a = b$

$$T_{xEC} (h_E - h_C) + T_{yNC} (h_N - h_C) + T_{xWC} (h_W - h_C) + T_{ySC} (h_S - h_C) = Q_C$$

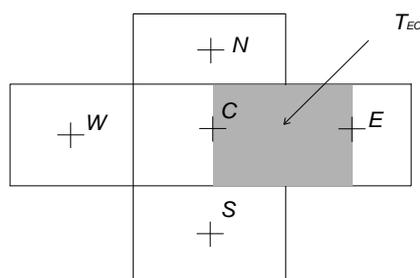
Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

10

Paramètres moyens-équivalents

... sur base de l'expression du principe de continuité

➔ valeurs 'moyennes' ou 'équivalentes' entre les cellules



$$\text{➔ } T_{xEC} = \frac{2 \cdot T_{xE} \cdot T_{xC}}{T_{xE} + T_{xC}}$$

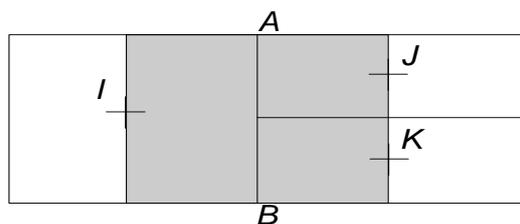
$$\text{➔ } T_{EC} = \frac{2 \cdot T_E \cdot T_C}{T_E + T_C}$$

11

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

Paramètres moyens-équivalents (2)

... pour un maillage emboîté (ou gigogne), le flux d'eau sur la frontière est exprimé par :



$$\text{➔ } \int_{AB} (T_x \cdot \frac{\partial h}{\partial x}) \cdot dy = \frac{4 \cdot T_I \cdot T_J \cdot T_K}{(T_I \cdot T_J + T_J \cdot T_K + T_K \cdot T_I)} \cdot (h_J - h_I + h_K - h_I)$$

12

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

Recommandations pratiques

- ➔ ... frontières à hauteurs piézométriques imposées doivent correspondre avec les points centraux des cellules
- ➔ ... frontières à flux imposés doivent correspondre avec les côtés de cellules

La résolution du système à n équations algébriques et $n = i \times j$ inconnues (h_{ij}), avec les conditions aux frontières, permet la résolution du problème

- ➔
 - inversion de la matrice du système
 - méthodes itératives (plus efficaces en termes de temps CPU et pour éviter les erreurs d'arrondis)
- ➔ une valeur initiale est nécessaire

Recommandations pratiques (2)

- ➔ ... un compromis doit être trouvé entre précision et portabilité du modèle
- ➔
 - la précision augmente avec le nombre de cellules, la portabilité par contre diminue
 - des nœuds doivent correspondre avec les points de pompage et de mesures piézométriques
 - des cellules plus petites doivent être utilisées lorsqu'un gradient plus important est attendu
 - des distances entre nœuds successifs supérieures à $1.5 \times$ la précédente sont à éviter (en vertu du calcul appliqué pour les valeurs moyennes des paramètres)
 - un rapport de maximum $1/10$ entre les dimensions des cellules rectangulaires (pour de bonnes conditions de calcul)

Écoulement transitoire

Principes généraux

$$\rightarrow S \cdot \frac{\partial h}{\partial t} = I + \frac{\partial}{\partial x} \left(T \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) \quad T = Cste$$

$$\Delta x = \Delta y = \Delta m = Cste$$

→ en plus: problème de l'intégration temporelle

$$\rightarrow \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{h(t + \Delta t) - h(t)}{\Delta t}$$

$$\rightarrow S \cdot \left(\frac{h_{ij}(t + \Delta t) - h_{ij}(t)}{\Delta t} \right) = I + \frac{T}{(\Delta m)^2} \cdot (h_{i+1j} + h_{i-1j} + h_{ij+1} + h_{ij-1} - 4h_{ij})$$

à quel moment les valeurs de hauteurs piézométriques sont-elles prises ?

15

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

Méthode explicite

→ ... à l'instant t

$$S \cdot \left(\frac{h_{ij}(t + \Delta t) - h_{ij}(t)}{\Delta t} \right) = I + \frac{T}{(\Delta m)^2} \cdot (h_{i+1j}(t) + h_{i-1j}(t) + h_{ij+1}(t) + h_{ij-1}(t) - 4h_{ij}(t))$$

l'inconnue $h_{ij}(t + \Delta t)$ peut être déduite directement en fonction de la valeur au temps t

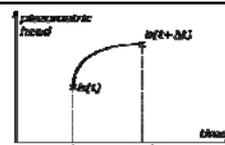
→ l'équation est explicite pour chaque inconnue (en chaque noeud) :

$$h_{ij}(t + \Delta t) = h_{ij}(t) + \frac{I \cdot \Delta t}{S} + \frac{T \cdot \Delta t}{(\Delta m)^2 \cdot S} \cdot (h_{i+1j}(t) + h_{i-1j}(t) + h_{ij+1}(t) + h_{ij-1}(t) - 4h_{ij}(t))$$

- ■ physiquement: peu précise
- numériquement: problème de stabilité dans certaines circonstances

16

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022



Méthode explicite

$$h_{ij}(t + \Delta t) = h_{ij}(t) + \frac{I \cdot \Delta t}{S} + \frac{T \cdot \Delta t}{(\Delta m)^2 \cdot S} \cdot (h_{i+1,j}(t) + h_{i-1,j}(t) + h_{i,j+1}(t) + h_{i,j-1}(t) - 4h_{ij}(t))$$

Exemple:

- île carrée
- valeur initiale $h = 10 \text{ m}$
- cond. aux frontières: $h = 10 \text{ m}$
- infiltration: 0.002 m/j
- $S = 0.4$; $T = 100 \text{ m}^2/\text{j}$
- $\Delta t = 10 \text{ jours}$

$$\frac{I \cdot \Delta t}{S} = 0.05 \qquad \frac{T \cdot \Delta t}{(\Delta m)^2 \cdot S} = 0.25$$

➔ ... calcul :

- 1^{er} pas de tps;
- 2^{ème} pas de tps;
- 3^{ème} pas de tps;
- ...

➔ ... pas de problème

17

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

Méthode explicite

$$h_{ij}(t + \Delta t) = h_{ij}(t) + \frac{I \cdot \Delta t}{S} + \frac{T \cdot \Delta t}{(\Delta m)^2 \cdot S} \cdot (h_{i+1,j}(t) + h_{i-1,j}(t) + h_{i,j+1}(t) + h_{i,j-1}(t) - 4h_{ij}(t))$$

➔ ... maintenant avec un $\Delta t = 40 \text{ jours}$

$$\frac{I \cdot \Delta t}{S} = 0.2 \qquad \frac{T \cdot \Delta t}{(\Delta m)^2 \cdot S} = 1$$

➔ ... calcul:

- 1^{er} pas de tps;
- 2^{ème} pas de tps;
- 3^{ème} pas de tps;
- ...

➔ ... instabilité numérique

18

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

Méthode explicite

$$h_{ij}(t+\Delta t) = h_{ij}(t) + \frac{I \cdot \Delta t}{S} + \frac{T \cdot \Delta t}{(\Delta m)^2 \cdot S} \cdot (h_{i+1,j}(t) + h_{i-1,j}(t) + h_{i,j+1}(t) + h_{i,j-1}(t) - 4h_{ij}(t))$$

... le cas le plus défavorable $\frac{I \cdot \Delta t}{S} = 0$ et $\frac{T \cdot \Delta t}{(\Delta m)^2 \cdot S} = \alpha$

$$\circ \quad 10 \pm \varepsilon \quad \circ$$

$$h_{ij}(t) = (10 - \varepsilon)$$

$$10 \pm \varepsilon \quad 10 \pm \varepsilon \quad 10 \pm \varepsilon$$

$$\rightarrow h_{ij}(t + \Delta t) = (10 - \varepsilon) + 0 + \alpha(8\varepsilon)$$

$$h_{ij}(t + \Delta t) = 10 + (8\alpha - 1)\varepsilon$$

$$\circ \quad 10 \pm \varepsilon \quad \circ$$

→ ... pour avoir la stabilité :

$$(8\alpha - 1)\varepsilon \leq \varepsilon$$

$$\rightarrow \alpha \leq 1/4$$

$$\rightarrow \frac{T \cdot \Delta t}{(\Delta m)^2 \cdot S} = \alpha \leq 1/4$$

19

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

Méthode explicite (2)

→ la stabilité des calculs dépend de la taille du pas de temps choisi par rapport à la taille des cellules et les valeurs des paramètres

critère de stabilité : $\frac{T \cdot \Delta t}{S \cdot (\Delta m)^2} \leq \frac{1}{4}$

$$\frac{T}{S} \cdot \left(\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2} \right) \leq \frac{1}{2} \quad \Delta x \neq \Delta y$$

→ Inconvénients additionnels :

- propagation des erreurs d'arrondis
- erreurs numériques
- temps de calcul CPU important

20

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

Méthode implicite

➔ ... à l'instant $t + \Delta t$

$$S \left(\frac{h_{ij}(t + \Delta t) - h_{ij}(t)}{\Delta t} \right) = I + \frac{T}{(\Delta m)^2} \cdot (h_{i+1,j}(t + \Delta t) + h_{i-1,j}(t + \Delta t) + h_{i,j+1}(t + \Delta t) + h_{i,j-1}(t + \Delta t) - 4h_{ij}(t + \Delta t))$$

➔ l'équation est écrite implicitement :

$$h_{ij}(t + \Delta t) = h_{ij}(t) + \frac{I \cdot \Delta t}{S} + \alpha \cdot (h_{i+1,j}(t + \Delta t) + h_{i-1,j}(t + \Delta t) + h_{i,j+1}(t + \Delta t) + h_{i,j-1}(t + \Delta t) - 4h_{ij}(t + \Delta t))$$

$$\alpha = \frac{T \cdot \Delta t}{S \cdot (\Delta m)^2}$$

Méthode implicite (2)

➔ l'inconnue ne peut pas être déduite directement sans résoudre l'ensemble du système d'équations

$$h_{ij}(t + \Delta t) \cdot [1 + 4 \cdot \alpha] = h_{ij}(t) + \frac{I \cdot \Delta t}{S} + \alpha \cdot (h_{i+1,j}(t + \Delta t) + h_{i-1,j}(t + \Delta t) + h_{i,j+1}(t + \Delta t) + h_{i,j-1}(t + \Delta t))$$

- **physiquement: peu précise**
- **numériquement: la stabilité est garantie**
- **mathématiquement: un peu plus lourde**

Méthode implicite

$$h_{ij}(t + \Delta t) \cdot [1 + 4\alpha] = h_{ij}(t) + \frac{I \cdot \Delta t}{S} + \alpha \cdot (h_{i+1,j}(t + \Delta t) + h_{i-1,j}(t + \Delta t) + h_{i,j+1}(t + \Delta t) + h_{i,j-1}(t + \Delta t))$$

10	10	10	10	10
10	10.125 10.2	10.135 10.2	10.125 10.2	10
10	10.135 10.2	10.158 10.2	10.135 10.2	10
10	10.125 10.2	10.135 10.2	10.125 10.2	10
10	10	10	10	10

... même avec un $\Delta t = 40$ jours

$$\frac{I \cdot \Delta t}{S} = 0.2 \quad \frac{T \cdot \Delta t}{(\Delta m)^2 \cdot S} = 1$$

... calcul:

- 1^{er} pas de tps;
- 2^{ème} pas de tps;
- ...

➔ ... numériquement stable

Méthode implicite

$$h_{ij}(t + \Delta t) \cdot [1 + 4\alpha] = h_{ij}(t) + \frac{I \cdot \Delta t}{S} + \alpha \cdot (h_{i+1,j}(t + \Delta t) + h_{i-1,j}(t + \Delta t) + h_{i,j+1}(t + \Delta t) + h_{i,j-1}(t + \Delta t))$$

... le cas le plus défavorable $\frac{I \cdot \Delta t}{S} = 0$ et $\frac{T \cdot \Delta t}{(\Delta m)^2 \cdot S} = \alpha$

$$\begin{array}{ccc} \circ & 10 \pm \varepsilon & \circ \\ 10 \pm \varepsilon & 10 \pm \varepsilon & 10 \pm \varepsilon \\ \circ & 10 \pm \varepsilon & \circ \end{array}$$

$$h_{ij}(t) = (10 - \varepsilon)$$

$$\rightarrow h_{ij}(t + \Delta t)(1 + 4\alpha) = (10 - \varepsilon) + 0 + 4\alpha(10 + \varepsilon)$$

$$h_{ij}(t + \Delta t) = \frac{(10 - \varepsilon) + 4\alpha(10 + \varepsilon)}{(1 + 4\alpha)}$$

➔ pour obtenir la stabilité :

$$h_{ij}(t + \Delta t) - 10 \leq \varepsilon$$

$$\rightarrow \frac{(10 - \varepsilon) + 4\alpha(10 + \varepsilon)}{(1 + 4\alpha)} - 10 \leq \varepsilon$$

$$\rightarrow 10 - \varepsilon + 40\alpha + 4\alpha\varepsilon < 10 + \varepsilon + 40\alpha + 4\alpha\varepsilon$$

... toujours le cas

Méthode de Crank-Nicholson

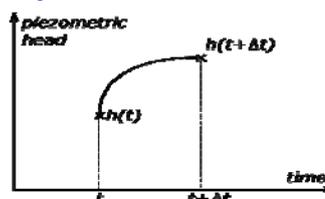
→ ... en un instant $t + \Delta t/2$

- ■ **physiquement: plus précis**
- **numériquement: procédure implicite, stabilité**

Méthode de Galerkin

→ ... en un instant $t + 2\Delta t/3$

- ■ **physiquement: encore meilleure**
- **numériquement: procédure implicite, stabilité**



Généralisation du schéma d'intégration temporelle

$$\frac{T}{(\Delta m)^2} (h_{i+1j} + h_{i-1j} + h_{ij+1} + h_{ij-1} - 4h_{ij}) + Q_{ij} = S \frac{h_{ij}(t + \Delta t) - h_{ij}(t)}{\Delta t}$$

$$\frac{T}{(\Delta m)^2} (1 - \theta) (h_{i+1j}(t) + h_{i-1j}(t) + h_{ij+1}(t) + h_{ij-1}(t) - 4h_{ij}(t)) + \frac{T}{(\Delta m)^2} \theta (h_{i+1j}(t + \Delta t) + h_{i-1j}(t + \Delta t) + h_{ij+1}(t + \Delta t) + h_{ij-1}(t + \Delta t) - 4h_{ij}(t + \Delta t))$$

$\theta = 0$ → **le schéma totalement explicite**

$\theta = 1$ → **le schéma totalement implicite**

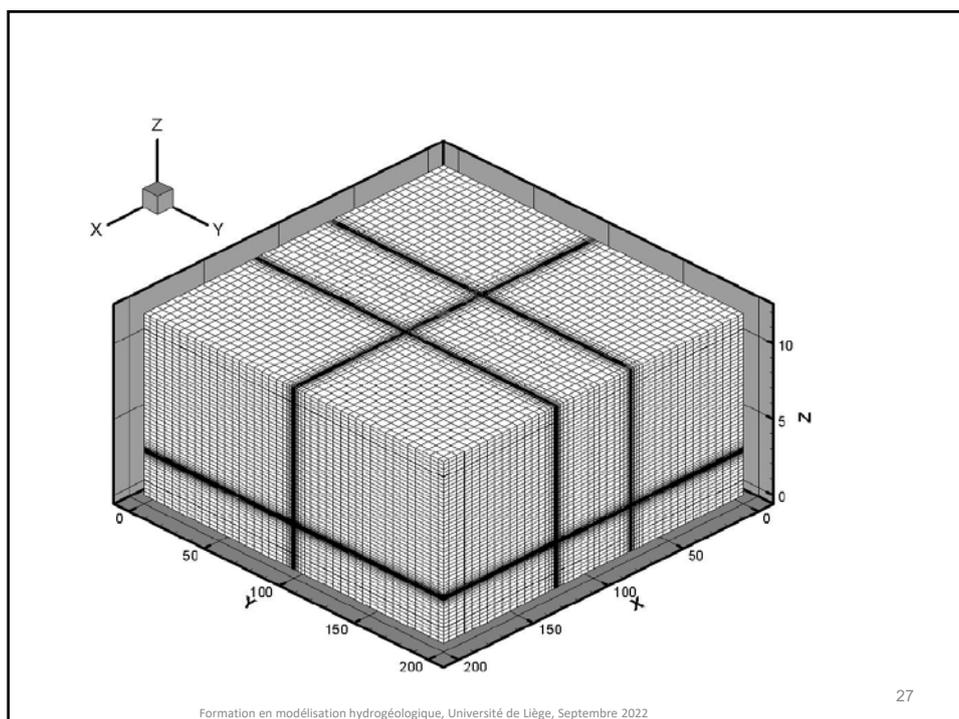
$\theta = 1/2$ → **le schéma de Crank-Nicholson**

$\theta = 2/3$ → **le schéma de Galerkin**

→ **Critère de stabilité** $\theta < 1/2$

$$0 < \Delta t < \frac{1}{2} \cdot \frac{S}{T} \cdot \frac{(\Delta x)^2 \cdot (\Delta y)^2}{[(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2]}$$

schémas d'intégration temporelle utilisés dans toutes les méthodes numériques

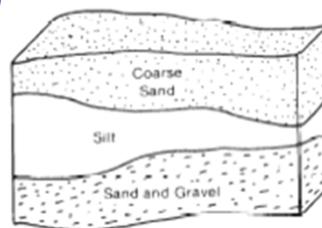


Unités hydrostratigraphiques

Définies selon propriétés hydrauliques (K , S_s , θ)

- **Échelle régionale**

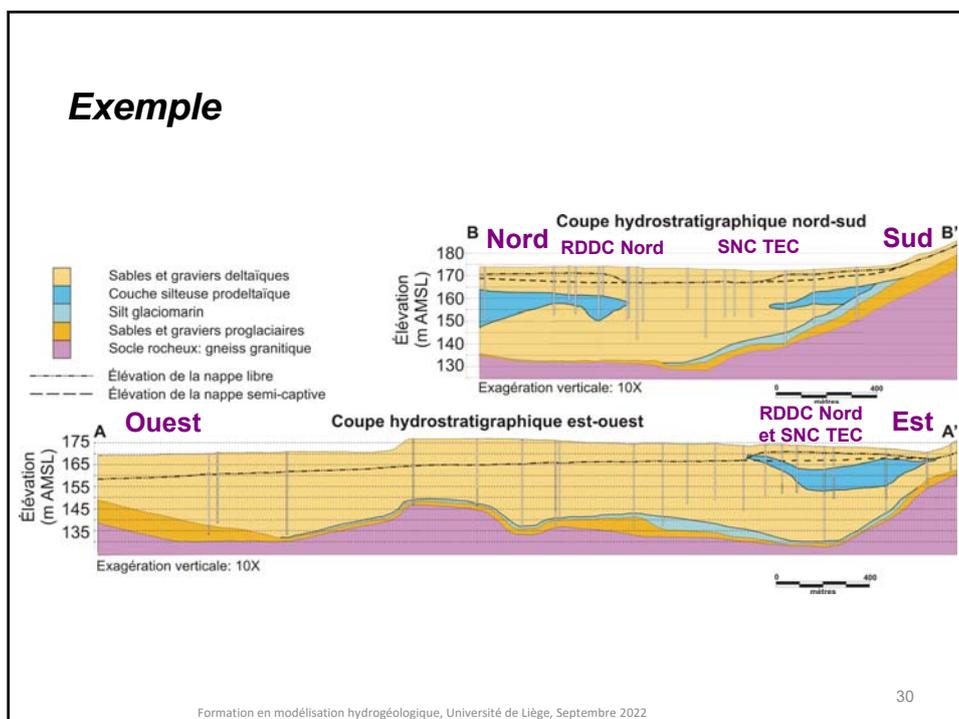
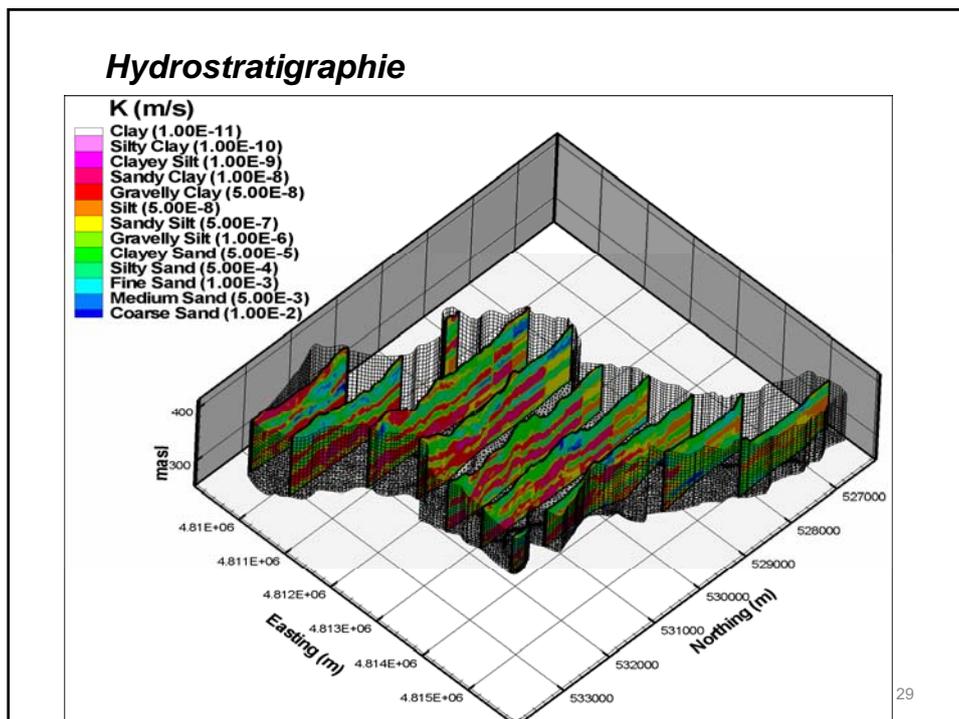
- **Aquifères (perméabilité élevée)**
- **Aquitards (perméabilité faible)**

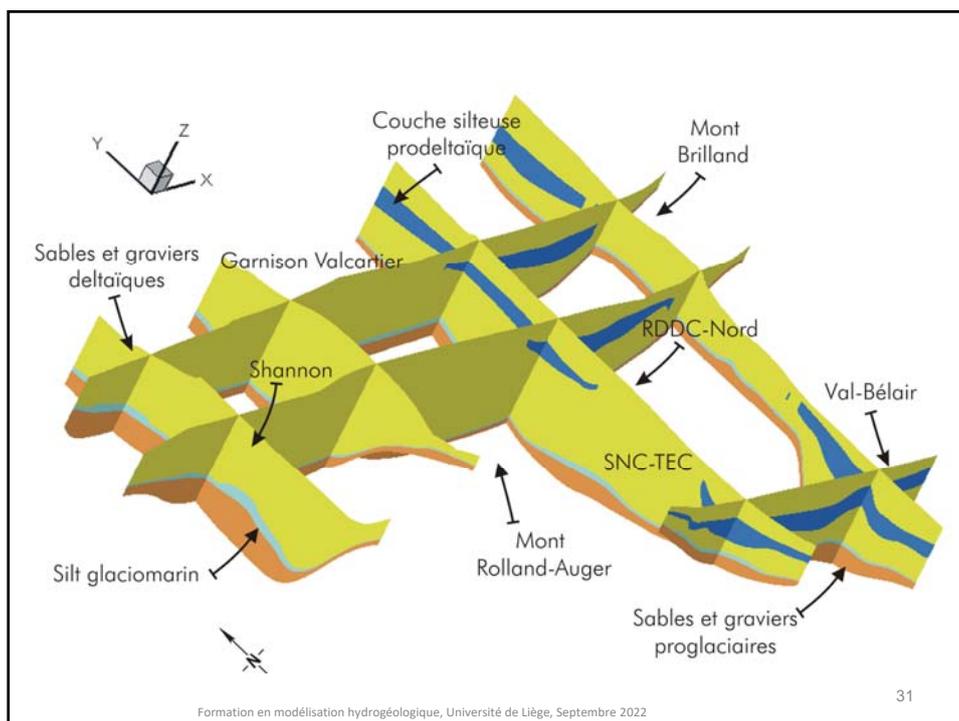


(a) Aquifer Cross Section

- **Échelle locale**

- **Unités stratigraphiques**
- **Représentation directe de l'hétérogénéité par interpolation (forages, puits, diagraphies)**





MODFLOW

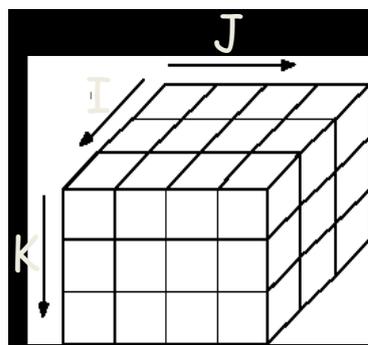
- *cellules centrées, quasi-3D ou 3D, logiciel résolvant par différences finies l'écoulement en milieu poreux saturé*
- *développé par McDonald & Harbaugh de l'USGS, 1983*
- *domaine public*
- *le plus utilisé par les hydrogéologues*
- *écoulement en milieu saturé, permanent et transitoire*

Entrée des données et traitement des résultats

- **“preprocessor”**: aide l'utilisateur à introduire toutes les données: sous format graphique
- **“postprocessor”**: aide à visualiser et imprimer les résultats
 - **Visual MODFLOW**
 - **GMS**
 - **PMWin**
 - **Groundwater Vistas**
 - ...

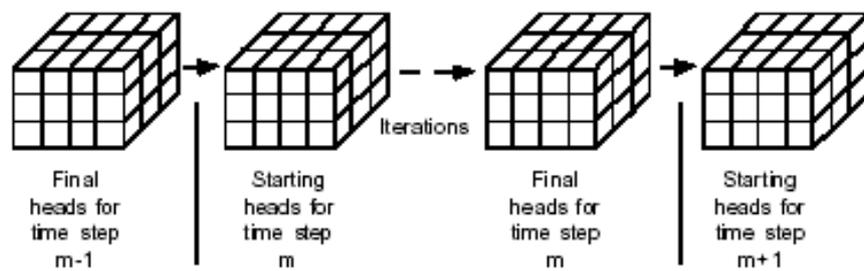
Modèle de différences finies

- **Grille 3D**
- **Cellules centrées**



Méthodes itératives

- *piézométrie initiale*
- *itérations à l'intérieur d'un pas de temps*



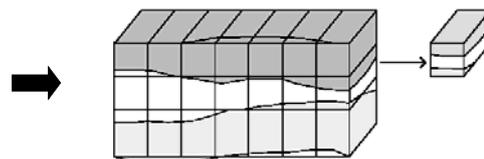
Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

35

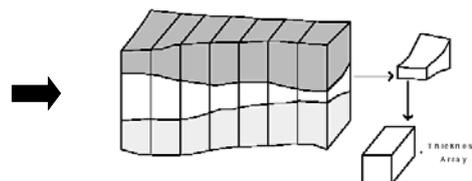
Discrétisation en couches

- *avec des grilles de cellules de différences finies:*

– *superposition*



– *pseudo-3D*



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

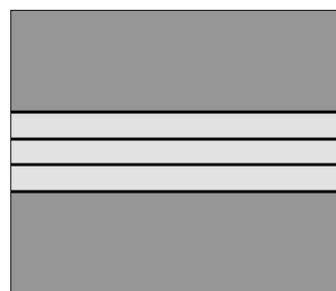
36

Couches peu perméables

- ***2 manières de les prendre en compte:***
 - ***une grille avec représentation explicite de la couche***
 - ***quasi-3D, les écoulements entre couches perméables régis par un terme de “leakance”***

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

37



aquifère 1

Couche peu perméable

Aquifère 2

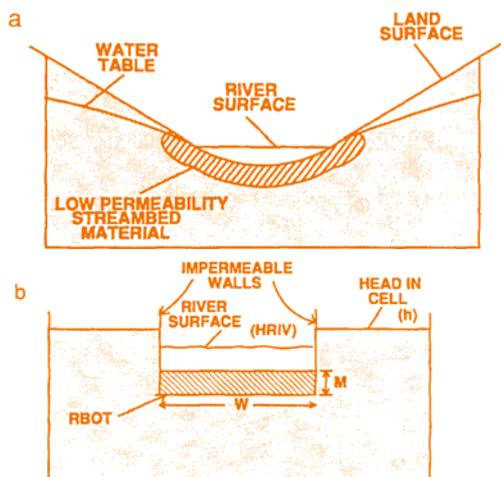
Quasi 3D



MODFLOW packages

- *Basic*
- *Output Control*
- *Block-Centered Flow*
- *River*
- *Drain*
- *General Head*
- *Well*
- *Changing Head Boundary*
- *Horizontal Flow Barrier*
- *Stream-Aquifer Interaction*
- *Recharge*
- *Evapotranspiration*
- *Strongly Implicit Procedure*
- *Slice-Successive Overrelaxation*
- *Pre-Conditioned Conjugate Gradient*

River Package (RIV) – Streamflow-Routing Package (STR1)



$$C_{RIV} = K_r LW / M$$

$$h > R_{BOT}$$

$$Q_{RIV} = C_{RIV} (H_{RIV} - h)$$

$$h \leq R_{BOT}$$

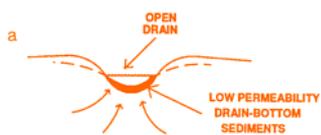
$$Q_{RIV} = C_{RIV} (H_{RIV} - R_{BOT})$$

Fig. 1
 (a) Stream-aquifer system.
 (b) Representation of the stream-aquifer system in the RIV Package.

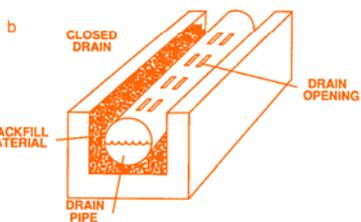
41

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

Drain Package (DRN)



$$h \leq d \rightarrow Q_D = 0$$



$$h > d$$

$$\rightarrow Q_D = C_D (h - d)$$

Fig. 2 Drains.
 (a) Open drain.
 (b) Closed drain.

42

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

General Head Boundary Package (GHB)

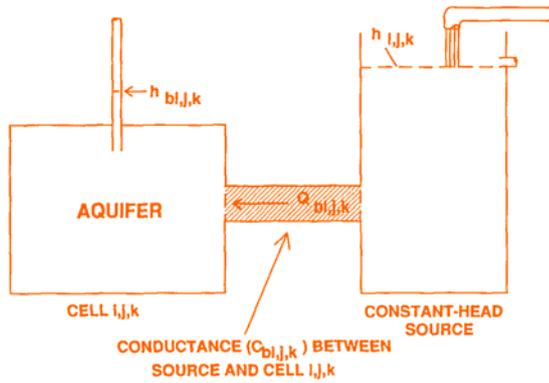


Fig. 4 Representation of a general head boundary in MODFLOW.

© 2022

43

Formation en modélisation hydrogéologique

Formation professionnelle dispensée à
l'Université de Liège
05 - 16 septembre 2022

Module n°6 : Calibration - Validation - Analyse de sensibilité

Prof A. Dassargues

Université de Liège, Département ArGEnCo
Geo³-Hydrogéologie et Géologie de l'Environnement



Calibration, validation, analyse de sensibilité du modèle

- ***Calibration et validation: principes***
- ***Analyse de sensibilité pour aider à la calibration***
- ***Modélisation inverse = calibration automatique***
- ***Incertitudes***

Differentes étapes nécessaires avant de faire des prédictions avec le modèle

Question à laquelle il faut répondre

Le plus important !

Ex. Impact de fertilisants sur la qualité des eaux souterraines, pompages supplémentaires en zone aride, zones de protections...

Differentes étapes nécessaires avant de faire des prédictions avec le modèle

Question à laquelle il faut répondre



Conceptualisation et implementation du modèle

Quels processus doivent être représentés

Dimensions, paramètres, conditions aux frontières, ...

Differentes étapes nécessaires avant de faire des prédictions avec le modèle

Question à laquelle il faut répondre

Conceptualisation et implementation du modèle

Calibration du modèle

Essayer que le modèle reproduise le mieux la réalité

Comparer les valeurs simulées et observées
Ajuster les valeurs des paramètres manuellement ou automatiquement

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

5

Differentes étapes nécessaires avant de faire des prédictions avec le modèle

Question à laquelle il faut répondre

Conceptualisation et implementation du modèle

Calibration du modèle

Validation de la calibration

Vérifier la calibration avec un autre jeu de données observées

Le modèle est-il OK pour simuler ces autres conditions ?

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

6

Differentes étapes nécessaires avant de faire des prédictions avec le modèle

Question to be answered

Conceptualisation et implementation du modèle

Calibration du modèle

Validation de la calibration

Use model for predictions

Est-ce que les simulations répondent à la question ?
C'est le but du modèle

grique, Université de Liège, Septembre 2022

7

Differentes étapes nécessaires avant de faire des prédictions avec le modèle

Question à laquelle il faut répondre

Conceptualisation et implementation du modèle

Calibration du modèle

Validation de la calibration

Utilisation du modèle pour des prédictions

Le plus important !

Ex. Impact de fertilisants sur la qualité des eaux souterraines, pompages supplémentaires en zone aride, zones de protections...

Quels processus doivent être représentés

Dimensions, paramètres, conditions aux frontières, ...

Essayer que le modèle reproduise le mieux la réalité

Comparer les valeurs simulées et observées
Ajuster les valeurs des paramètres manuellement ou automatiquement

Vérifier la calibration avec un autre jeu de données observées

Le modèle est-il OK pour simuler ces autres conditions ?

Est-ce que les simulations répondent à la question posée ? C'est le but du modèle !

grique, Université de Liège, Septembre 2022

8

1. Principes de calibration

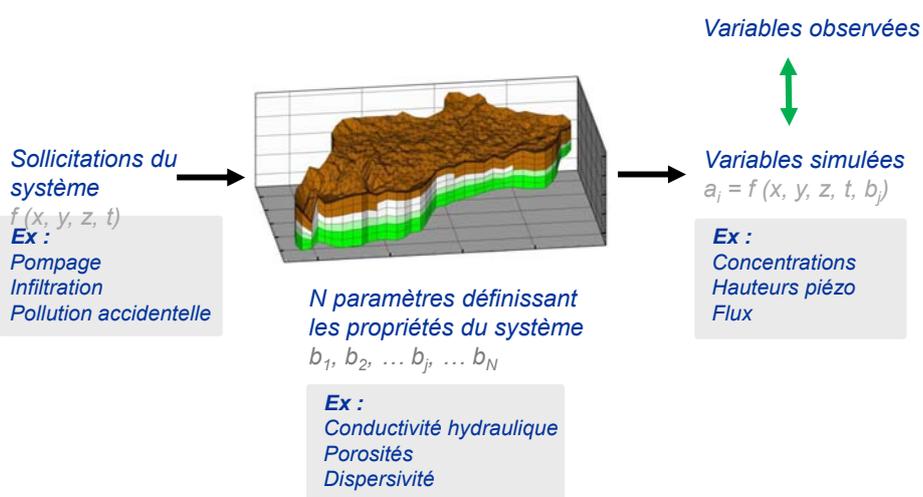
2. Analyse de sensibilité (outil de calibration)

3. Modélisation inverse

4. Analyse d'incertitude

9

Systeme hydrogéologique défini par un nombre limité de paramètres



La calibration tend à faire en sorte que le modèle soit le plus proche de la réalité

Comparison des valeurs simulées et observées en certains points
 Dépendent des données disponibles dans la zone modélisée
 Minimisation d'une 'Fonction Objectif' en ajustant les valeurs des paramètres

Exemple de
 'Fonction Objectif'

$$S(\underline{b}) = \sum_{i=1}^{ND} [y_i - y'_i]^2$$

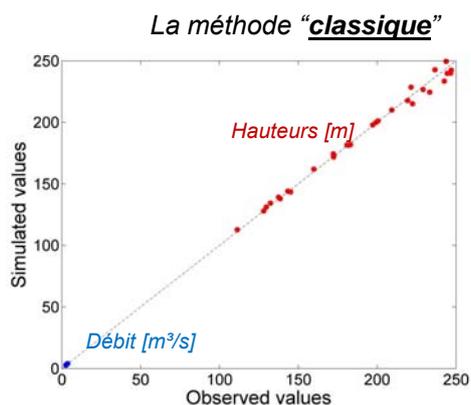
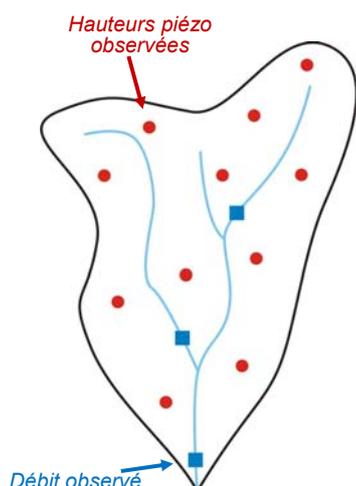
↑ Valeurs observées
 ↑ Valeurs simulées

Seulement pour les processus concernés par rapport à la question posée !

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

11

... différentes manières de présenter les résultats



Difficile de comparer différents types d'observations
 Ex. Hauteurs piézométriques [m] et débit [m³/s]

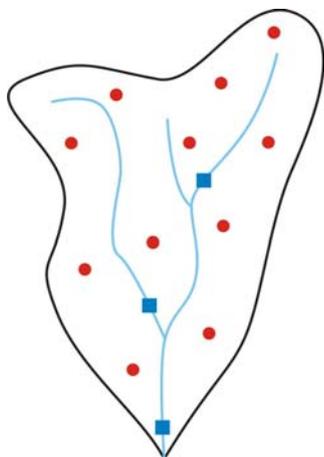
Moyen parfait pour cacher que la calibration n'est pas bonne !!!

Autre analyse est nécessaire pour évaluation honnête

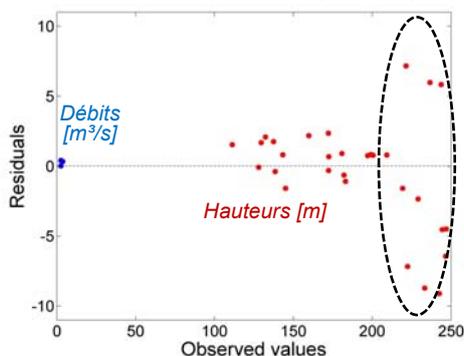
Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

12

... différentes manières de présenter les résultats



Utiliser les **résidus** $(y_i - y'_i)$



Plus facile d'analyser la qualité de la calibration
Des points ne sont pas très bons

Toujours difficile de comparer différents types
d'observations

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

13

... différentes manières de présenter les résultats

Utiliser les **résidus pondérés**

$$\text{poids} \quad \text{résidu} \quad \text{poids} \quad \text{résidu}$$

$$w_i^{1/2} \times (y_i - y'_i(\underline{b})) = \frac{1}{\sigma_i} \times (y_i - y'_i(\underline{b}))$$

↑
Ecart type (standard deviation) des mesures
observées
= incertitude sur les mesures observées

Donner plus d'importance aux observations les plus
'certaines' (... donner plus d'importance aux
données les plus 'intégratrices'): choix du
modélisateur, à justifier

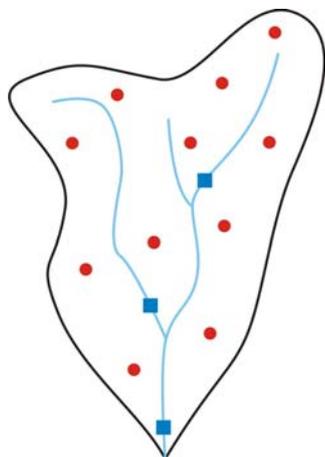
Rend les valeurs non-dimensionnelles

Permet une calibration automatique par modèle
inverse et une analyse d'incertitude

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

14

... différentes manières de présenter les résultats



Hauteurs piézo observées
95% intervalle de confiance = 2m

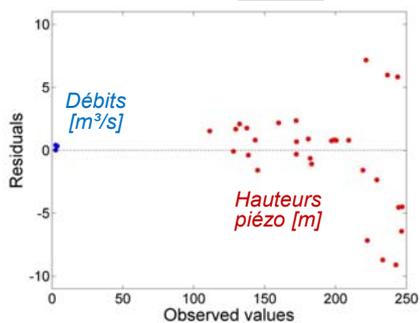
$$\rightarrow w_i = 1.96 \text{ m}^{-1}$$

Débits observés
Coefficient de variation = 5%

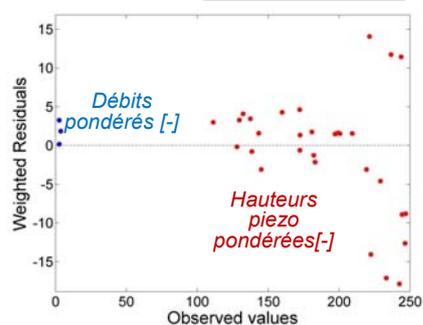
$$\rightarrow w_i \approx 5 \text{ (m}^3\text{/s)}^{-1}$$

... différentes manières de présenter les résultats

Utiliser les résidus



Utiliser les résidus pondérés



Graphiques des résidus: analysés quantitativement et qualitativement

Il est utile/conseillé de tester différents types de 'Fonction Objectif'
Carré des résidus, valeurs absolues, Nash-Sutcliffe, ...

Aim of the study	Objective function
General baseflow evolution in a watershed	NSE_q
Max value of the baseflow	PE_q
General variation of piezometric heads	RMS_h
Max variations of the piezometric heads	$HHVE_h$
...	

$$NSE_q = 1 - \frac{\sum_{t=1}^{nt} (q_t^{sim} - q_t^{obs})^2}{\sum_{t=1}^{nt} (q_t^{obs} - \mu^{obs})^2} = 2 \times \frac{\sigma^{sim}}{\sigma^{obs}} \times r_{lin} - \left(\frac{\sigma^{sim}}{\sigma^{obs}} \right)^2 - \left(\frac{\mu^{sim} - \mu^{obs}}{\sigma^{obs}} \right)^2$$

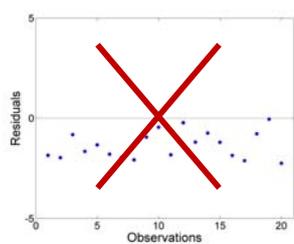
$$RMS_h = \sqrt{\frac{1}{nt} \times \sum_{t=1}^{nt} (h_t^{sim} - h_t^{obs})^2}$$

$$PE_q = \left(\frac{q_{peak}^{sim}}{q_{peak}^{obs}} - 1 \right) \times 100$$

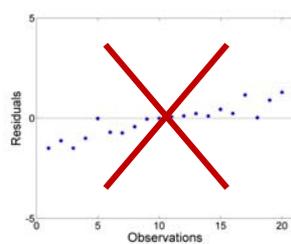
(S. Wildemeersch, PhD, 2012)

$$HHVE_h = \left(\frac{h_{max}^{sim} - h_{min}^{sim}}{h_{max}^{obs} - h_{min}^{obs}} - 1 \right) \times 100$$

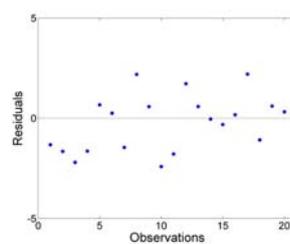
Graphiques des résidus: analysés quantitativement et qualitativement



*Sous-estimation
systématique
Pas acceptable*



*Tendance dans les
valeurs
Pas acceptable*



*Résidus distribués au
hasard autour de zéro
Acceptable*

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

19

1. Principes de calibration

2. Analyse de sensibilité (outil de calibration)

3. Modélisation inverse

4. Analyse d'incertitude

20

Analyse de sensibilité: fournit de l'information sur la manière dont les valeurs des paramètres influencent le système

Fournit de l'information sur la relation entre paramètres et observations
Utile pour 'sentir' comment le modèle se comporte

Fournit un 'feedback' sur le modèle conceptuel
Est-ce que les processus simulés sont sensibles aux paramètres choisis ?

Utile pour l'étape de calibration !
Il n'est pas utile d'ajuster la valeur de paramètres auxquels le modèle n'est pas sensible

→ L'analyse de sensibilité est une tâche additionnelle
... mais permet un gain de temps appréciable pour les étapes ultérieures !

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

21

Différentes sensibilités

1. Sensibilité simple

Calculée en utilisant la 'méthode des perturbations'

$$\left. \begin{array}{l} \text{Variable simulée} \\ \text{au point d'observation } i \\ \left(\frac{\partial y_i'}{\partial b_j} \right) \Big|_{\underline{b}} \end{array} \right\} \approx \left(\frac{y_i'(\underline{b} + \Delta \underline{b}) - y_i'(\underline{b})}{\Delta b_j} \right)$$

↑
Incrément sur le paramètre j

→ Indique le changement dans la valeur simulée correspondant à un changement donné (incrément) dans la valeur du paramètre

Difficile de comparer les sensibilités quand les unités sont différentes !

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

22

Différentes sensibilités

2. Sensibilité sans dimension et mise à l'échelle (Scaled Sensitivities (dss))

Fournit une pondération à la sensibilité simple (et la rend adimensionnelle)

$$dss_{ij} = \left(\frac{\partial y'_i}{\partial b_j} \right) \bigg|_{b_j} \frac{b_j}{100} \left(\frac{100}{\sigma_i} \right)$$

Ecart type (standard deviation) de l'erreur d'observation
Dépend de l'intervalle de confiance des valeurs observées

→ Indique le changement dans la valeur simulée correspondant à un changement de 1% (incrément) dans la valeur du paramètre

Exprimée en % de l'erreur d'observation = écart type (standard deviation)

→ Avantages

plus d'importance aux données précises
rend la sensibilité adimensionnelle et comparable
permet l'analyse de sensibilité

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

23

Différentes sensibilités

3. Sensibilité composite non-dimensionnelle

(Composite scaled sensitivities css)

Fournit une information pour chaque paramètre considérant toutes les observations

$$css_j = \left[\sum_{i=1}^{ND} \left(dss_{ij} \right)_{b_j}^2 / ND \right]$$

Nombre de valeurs observées

→ Indique l'importance de l'ensemble des observations pour un paramètre donné

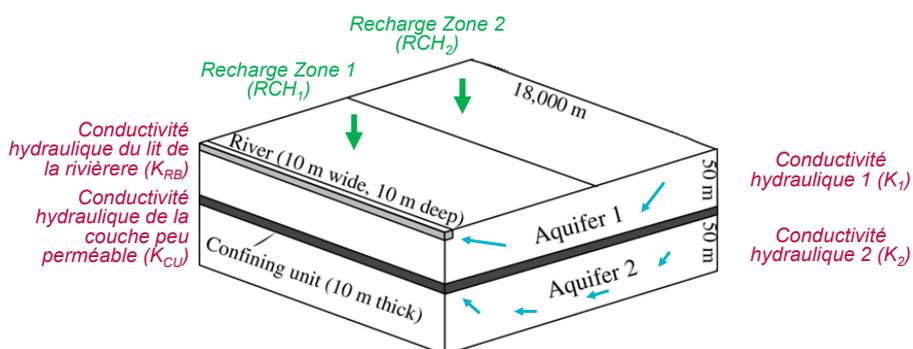
Une valeur pour chaque paramètre

Utile pour comparer aisément la sensibilité des différents paramètres

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

24

Exemple pour un problème d'écoulement simple dans un aquifère alluvial



Modified from Hill and Tiedeman (2007)

L'étude de sensibilité est faite en considérant :

- 6 "paramètres" (valeurs de Recharge incluses !)
- Hauteurs piézométriques et débits de base comme observations

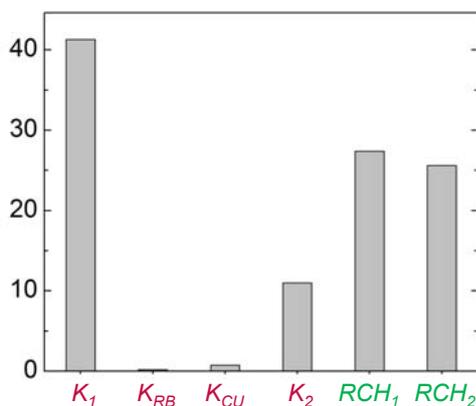
Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

25

Exemple pour un problème d'écoulement simple dans un aquifère alluvial

Deux paramètres sont quasi insensibles

Sensibilité composite (Composite Scaled Sensitivity) [-]



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

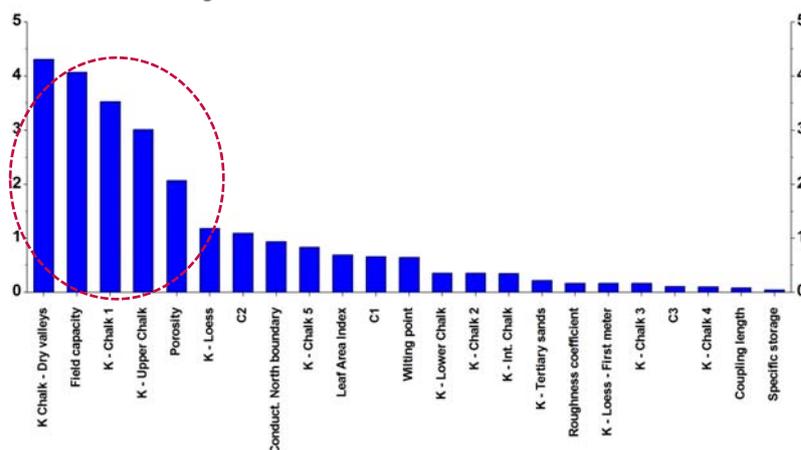
26

Autre exemple ...

Calculer les sensibilités est particulièrement utile quand le nombre de paramètres est important

Composite Scaled Sensitivity [-]

Exemple d'un modèle intégré eaux de surface – eaux souterraines



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

27

Certains paramètres peuvent être corrélés

Un changement de leurs valeurs a le même effet sur les résultats simulés
Cela signifie que la meilleure combinaison de valeurs des paramètres concernés n'est pas unique !

Exemple avec la loi de Darcy

$$q = K \times \nabla H \quad \Leftrightarrow \quad \nabla H = \frac{q}{K} \approx \frac{R}{K}$$

Augmenter R ou diminuer K a le même effet sur H !

Une infinité de couples de valeurs (R, K) est possible
Dangereux pour le transport de soluté car q n'est pas assez contraint !

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

28

Certains paramètres peuvent être corrélés

4. Coefficients de corrélation entre paramètres (Parameter Correlation Coefficients pcc)

$$pcc_{jl} = \frac{Cov(b_j, b_l)}{\sqrt{Var(b_j)Var(b_l)}}$$

$j = 1, \dots, k \quad l = 1, \dots, k$

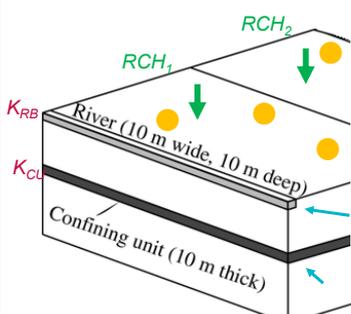
→ Indique le degré de corrélation entre paramètres (pris 2 à 2)
 pcc > 0.95 est un signal d'une forte corrélation
 une solution consiste à rajouter des observations d'un autre type

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

29

K et R sont très corrélés quand on n'utilise que les hauteurs piézométriques pour calibrer

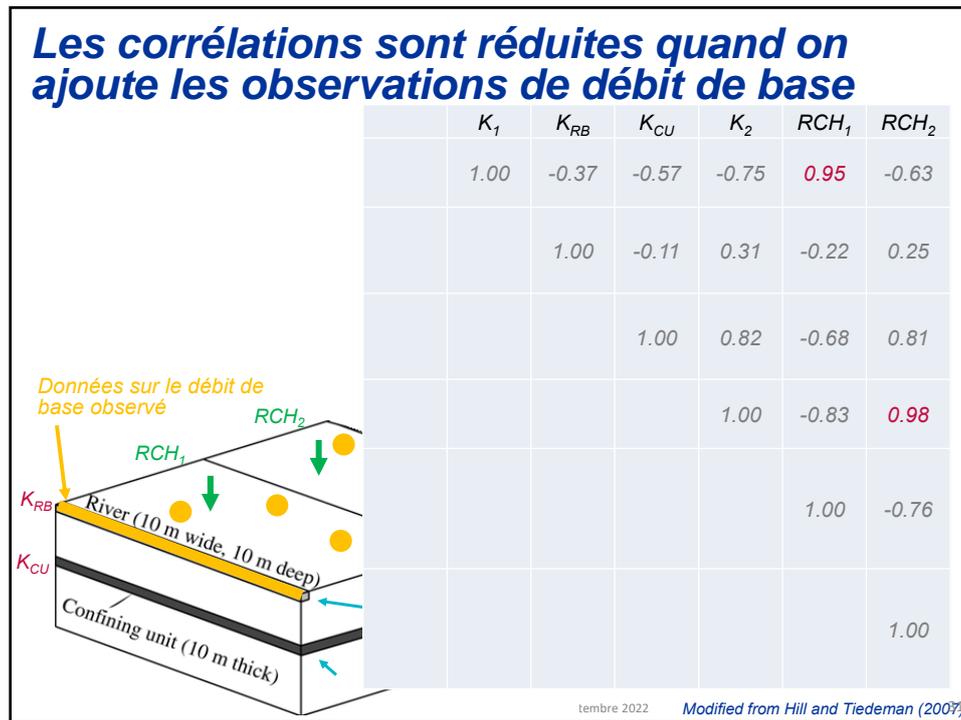
	K_1	K_{RB}	K_{CU}	K_2	RCH_1	RCH_2
	1.00	0.97	1.00	1.00	1.00	1.00
		1.00	0.97	0.97	0.97	0.97
			1.00	1.00	1.00	1.00
				1.00	1.00	1.00
					1.00	1.00
						1.00



The diagram shows a cross-section of a river and a confining unit. The river is 10 m wide and 10 m deep. The confining unit is 10 m thick. Parameters are indicated: K_1 (river), K_{RB} (river bed), K_{CU} (confining unit), K_2 (aquifer), RCH_1 (river channel recharge), and RCH_2 (river bank recharge).

tembre 2022

Modified from Hill and Tiedeman (2007)



1. Principes de calibration

2. Analyse de sensibilité (outil de calibration)

3. Modélisation inverse

4. Analyse d'incertitude

Calibration a pour but de minimiser les erreurs entre valeurs simulées et observées

Calibration par essai-erreur (trial-and-error calibration)

Les valeurs des paramètres sont modifiées manuellement

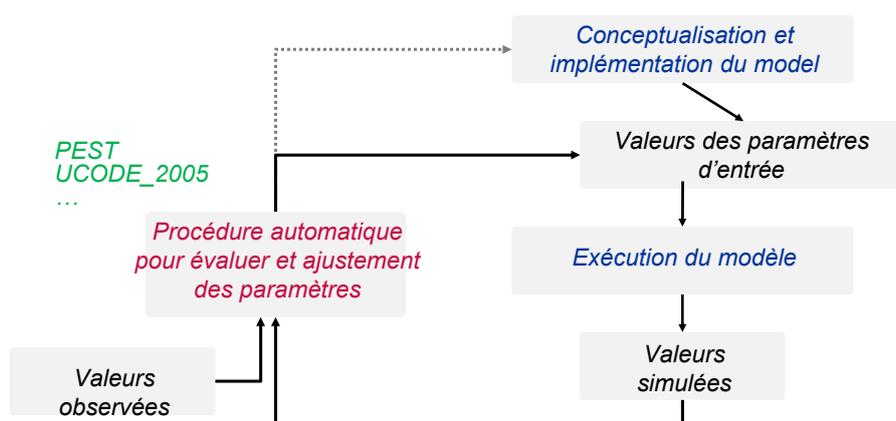
- ☺ Modèle conceptuel peut être modifié plus facilement si nécessaire
- ☹ Subjectivité – pas très efficace
Prend du temps

Calibration automatique (modèle inverse) (inverse calibration)

On obtient le set de paramètres 'optimaux' pour minimiser la 'Fonction Objectif'

- ☺ Objectivité
Statistiques permettant d'évaluer la qualité de la calibration et des prédictions
- ☹ Minima locaux possibles
Convergence parfois difficile

Méthode de calibration automatique gérée par des procédures itératives



... trouver le set de paramètres qui minimise la fonction objectif

Fonction Objectif à minimiser

Plusieurs dimensions (= nombre de paramètres)

Non linéarité

$$S(\underline{b}) = \sum_{i=1}^{N_h} \omega_i [h_i - h'_i(\underline{b})]^2 + \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i [q_i - q'_i(\underline{b})]^2 + \dots$$

$\xrightarrow{\text{h piézo}}$
 $\xrightarrow{\text{débits}}$

\uparrow
 \uparrow

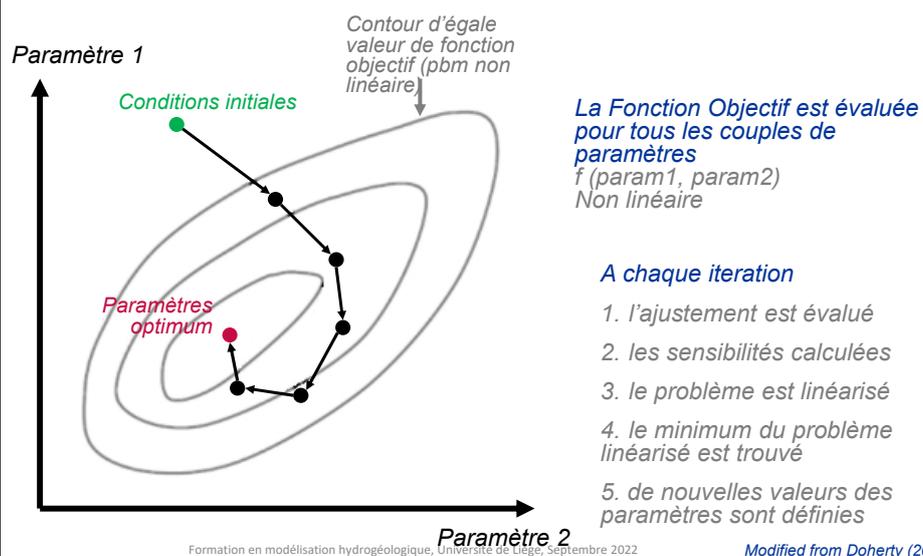
poids
résidus

Codes utilisés le plus fréquemment UCODE_2005 et PEST

Couplés aux modèles d'écoulement et de transport

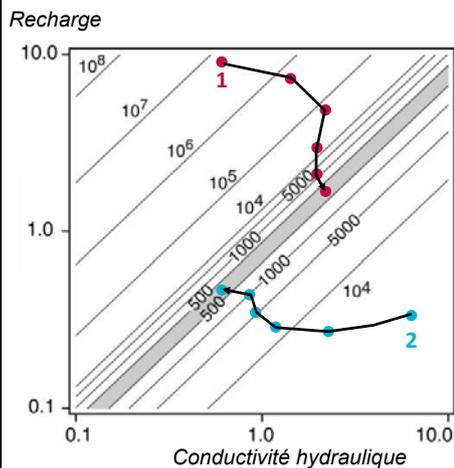
Utilisent la méthode modifiée de Gauss-Newton pour la régression

Problème à 2 paramètres (pour expliquer...)

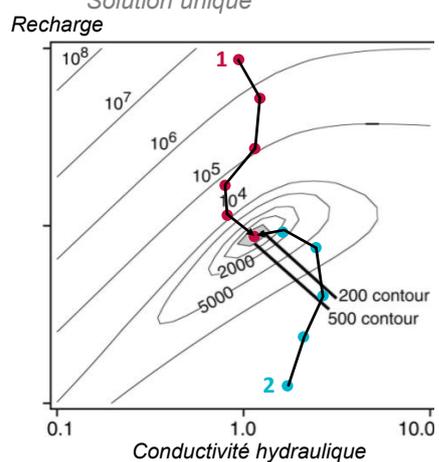


Le problème peut être non unique si des paramètres sont corrélés

Avec seulement hauteurs piézo
Solution non unique



Avec hauteurs piézo et débits de base observés
Solution unique



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022 Modified from Hill and Tiedeman (2007)

1. Principes de calibration

2. Analyse de sensibilité (outil de calibration)

3. Modélisation inverse

4. Analyse d'incertitude

Résultats de la calibration automatique peuvent être utilisés pour calculer l'incertitude des prédictions

Une méthode possible utilise des statistiques inférentielles
Fournit l'intervalle de confiance linéaire autour des valeurs des paramètres et des prédictions

Ecart type (standard deviation) des prédictions

$$s_{p_i} = \left[\sum_i^{NPAR} \sum_j^{NPAR} \frac{\partial p'_i}{\partial b_j} \times \left(\frac{\sum_i^{NObs} w_i [y_i - y'_i(\underline{b})]^2}{(NObs - NPar)} \right)^{1/2} \times \left(\frac{\partial \underline{y}'^T}{\partial \underline{b}} \cdot \underline{w} \cdot \frac{\partial \underline{y}'}{\partial \underline{b}} \right)^{-1} \right]_{ij} \times \frac{\partial p'_i}{\partial b_j} \Bigg]^{1/2}$$

Résidus pondérés

Sensibilité des prédictions aux valeurs des paramètres

Sensibilité des valeurs des paramètres aux observations

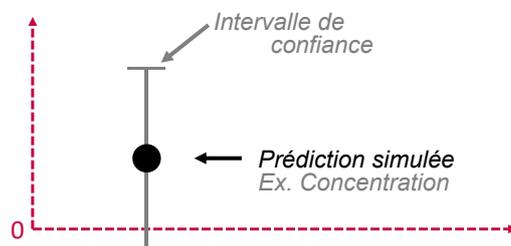
Sensibilité des prédictions aux valeurs des paramètres

Ecart-type (standard deviation) → Intervalle de Confiance

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022 Modified from Hill and Tiedeman (2007)

La méthode fournit un intervalle de confiance 'linéaire'

Utilise les sensibilités uniquement pour les valeurs calibrées
Cela simplifie le problème
Fournit des intervalles de confiance symétriques



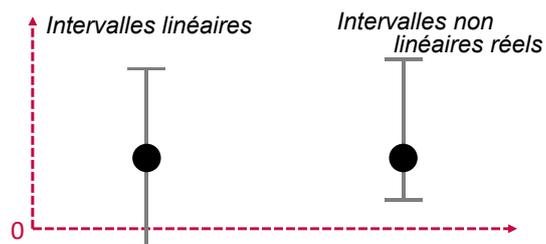
Ces intervalles peuvent être imprécis si le problème est trop non linéaire !
Sensibilités peuvent varier beaucoup en fonction des valeurs des paramètres et de l'état du système

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

40

La méthode fournit un intervalle de confiance 'linéaire'

Utilise les sensibilités uniquement pour les valeurs calibrées
Cela simplifie le problème
Fournit des intervalles de confiance symétriques



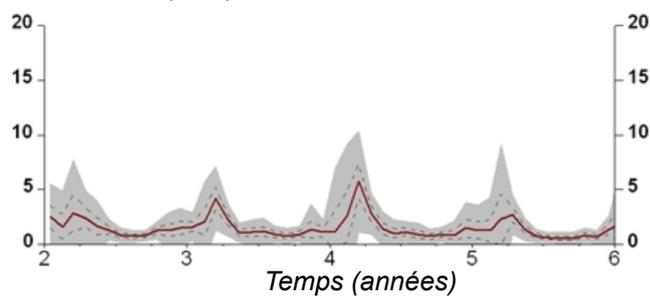
Ces intervalles peuvent être imprécis si le problème est trop non linéaire !
Sensibilités peuvent varier beaucoup en fonction des valeurs des paramètres et de l'état du système

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

41

La méthode fournit un intervalle de confiance 'linéaire'

Débit simulé venant des eaux souterraines
dans le bassin du Geer (m^3/s)



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

42

Des méthodes alternatives sont disponibles pour calculer des intervalles de confiance non-linéaires

*Elles nécessitent de calculer toutes les sensibilités
Beaucoup plus de calculs !
Prend beaucoup de temps*

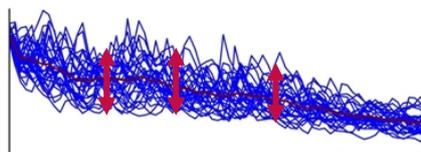
Simulations Monte Carlo

*Les valeurs des paramètres sont générées stochastiquement sur des intervalles réalistes
Statistiques sont calculées sur l'ensemble des résultats simulés*

*Valeurs du paramètre
générées stochastiquement
dans l'intervalle*



Prédictions simulées



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

43