

## Chapitre 2

# Problème inverse en hydrogéologie

Au cours des trente dernières années, les techniques de modélisation mathématique ont été intensément utilisées en hydrogéologie dans les études de gestion, d'exploitation et de remédiation des nappes aquifères, d'intrusion d'eaux salées, de détermination des zones de protection autour de puits de captage et autres problèmes liés aux eaux souterraines. Les méthodes analytiques ont fourni des solutions précises du problème exprimé explicitement à l'aide de fonctions mathématiques connues. Les chercheurs se sont cependant vite rendus compte que la résolution analytique des problèmes hydrogéologiques complexes était limitée par des hypothèses bien souvent trop simplificatrices. Un grand nombre d'entre eux se sont donc naturellement tournés vers les méthodes numériques. Ces méthodes, bien que demandant des efforts de calculs parfois plus importants, fournissent des outils puissants d'analyse et de simulation, qui permettent de résoudre des problèmes d'écoulement souterrain et de transport de contaminant dans des systèmes bi- ou tri-dimensionnels, fortement hétérogènes et à géométrie complexe.

## 2.1 Problème direct et problème inverse

L'équation générale exprimant l'écoulement souterrain dans un domaine  $\mathcal{D}$  fini et continu peut s'écrire,

$$\operatorname{div}[\underline{\underline{K}} \operatorname{grad} h] - q = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.1)$$

où  $\underline{\underline{K}}$  est le tenseur de la conductivité hydraulique [ $LT^{-1}$ ],  $h$  la charge hydraulique (ou hauteur piézométrique) [L],  $q$  le terme source (injection ou pompage) [ $T^{-1}$ ],  $S_s$  le coefficient d'emmagasinement spécifique [ $L^{-1}$ ] et  $t$  le temps [T].

Les méthodes numériques, telles que les différences finies ou les éléments finis, discrétisent le domaine spatio-temporel en éléments. La solution de l'équation d'écoulement (c'est-à-dire la distribution des charges hydrauliques dans le domaine  $\mathcal{D}$  en fonction du temps) nécessite la spécification des propriétés du modèle en chacun des nœuds ainsi que les conditions aux frontières du domaine  $\mathcal{D}$ , en terme de hauteur piézométrique imposée ou de flux imposé. Pour modéliser un système aquifère réel, deux problèmes doivent être résolus : le problème direct et le problème inverse.

Le **problème direct** simule les états inconnus du système en chaque nœud en résolvant les équations aux dérivées partielles provenant de la discrétisation des équations régissant le système. On parle aussi de **simulation** du modèle d'écoulement. Dans une situation idéale, pour laquelle les propriétés du système sont connues de manière exacte, les charges hydrauliques calculées coïncident parfaitement avec les charges mesurées aux points de données. Cependant, ce genre de situation n'est jamais rencontré. En pratique, il est très difficile, voir impossible, de construire un modèle exact du système aquifère : non seulement les équations régissant le système sont des approximations du phénomène physique réel, mais les propriétés du système, telles que la géométrie de l'aquifère, les paramètres hydrogéologiques, les conditions aux frontières, les termes de sources, etc. sont difficiles à mesurer de manière précise sur le terrain. Elles sont entachées d'erreurs de mesure et consistent souvent en des estimations ou des interpolations. En revanche, la charge hydraulique – variable d'état du système aquifère – est directement mesurable aux puits d'observations.

Le **problème inverse** consiste lui à rechercher les valeurs inconnues des propriétés du modèle (appelées paramètres) en utilisant les variables d'état du système (charge hydraulique) connues aux points de mesure dans le but de faire coïncider la relation entrée-sortie du modèle avec toute relation excitation-réponse observée sur le terrain. L'équation générale

d'écoulement est donc résolue de manière à identifier les paramètres qui permettent de simuler les charges hydrauliques observées. On parle alors de **calibration** du modèle d'écoulement ou de procédure d'identification des paramètres. Dans les formulations "directe" et "inverse" du problème, les données et les inconnues sont permutées. Le problème inverse est donc, comme son nom l'indique, l'application inverse du problème direct.

Dans la pratique, les modèles hydrogéologiques sont généralement utilisés à des fins prévisionnelles. On résout alors d'abord le problème inverse en utilisant les observations mesurées afin d'évaluer les paramètres du modèle, puis le problème direct afin de simuler les états du système pour différentes sollicitations extérieures.

Dans ce travail, nous nous limiterons à l'identification de la **conductivité hydraulique** des aquifères **en régime permanent**, où seuls des états piézométriques stabilisés sont disponibles. C'est en effet le problème le plus fréquent et le plus étudié. L'équation générale d'écoulement s'écrit alors,

$$\operatorname{div}\left[\underline{K} \operatorname{grad} h\right] - q = 0 \quad (2.2)$$

Notons toutefois que l'hydrogéologie n'a pas l'apanage des problèmes inverses : ils existent sous la même forme en étude du gisement pétrolier ou sous forme un peu différente en géophysique (pour l'identification des vitesses en sismique, des résistivités en tomographie électrique, etc.) avec cette nuance que le géophysicien engendre – et donc connaît – les signaux générateurs des réponses du système qu'il enregistre. L'inversion des signaux géophysiques s'effectue alors sur un modèle de propagation du signal ou de structure du sous-sol défini *a priori*.

En raison de la complexité de certains systèmes réels et du manque de données disponibles, le problème inverse est souvent "mal posé" au sens de HADAMARD [1952], c'est-à-dire qu'il satisfait l'une des conditions d'inexistence, de non-unicité ou d'instabilité de la solution. Ceci limite souvent l'utilisation de la modélisation inverse et peut rendre impossible la résolution du problème. On parle d'**inexistence** lorsque aucune fonction satisfaisant les équations du système n'existe, de **non-unicité** lorsque plus d'une solution existe, c'est-à-dire lorsque différentes combinaisons de valeurs des paramètres permettent un ajustement optimum sur les observations, et d'**instabilité** lorsque de faibles variations des données d'entrées modifient de manière importante les résultats du modèle. On parle également d'**insensibilité** lorsque les observations ne contiennent pas assez d'information pour assurer l'estimation des paramètres. Afin d'améliorer la formulation du problème inverse, différentes mesures peuvent être prises telles que la réduction du nombre de paramètres à estimer (paramétrisation) ou la prise en compte de mesures directes et locales des paramètres estimés

(information *a priori*). Il est bon de noter que pour certains paramètres, la convergence du problème inverse peut être améliorée en travaillant avec leur transformation logarithmique (c'est le cas de la conductivité hydraulique).

### 2.1.1 Paramétrisation

Les méthodes numériques discrétisent le domaine spatial en engendrant plusieurs milliers d'éléments. Pour un aquifère non-homogène, chacun de ces éléments peut se voir affecté d'une valeur de conductivité hydraulique inconnue. Le problème inverse possède dès lors plusieurs milliers d'inconnues (ou de degrés de libertés) considérées comme les **paramètres** ajustables du système. Sachant que le nombre d'observations concernant la variable dépendante (à savoir la charge hydraulique) est beaucoup plus faible (de l'ordre d'une ou plusieurs dizaines), il est clair que le nombre d'inconnues est bien trop élevé et doit impérativement être réduit. La **paramétrisation** consiste à réduire le nombre de paramètres à identifier par l'approche inverse. YEH & YOON [1981], SUN & YEH [1985] et CARRERA & NEUMAN [1986 a, b, c] se sont penchés sur l'importance de la réduction du nombre de paramètres : la paramétrisation rend le problème plus stable, ce qui réduit les difficultés de convergence et rend le problème "mieux posé". Deux types d'erreurs sont associés au problème inverse : l'erreur de modélisation et l'erreur associée à l'incertitude des paramètres. Une augmentation du nombre de paramètres va généralement réduire l'erreur du modèle, mais va augmenter l'incertitude des paramètres utilisés et inversement. Le niveau optimal de paramétrisation dépend donc de la quantité et de la qualité des observations. De manière générale, afin d'obtenir une solution valide, le nombre de paramètres ajustables doit être inférieur au nombre d'observations.

Différents types de paramétrisation sont proposés dans la littérature, tel que la zonation [COOLEY, 1977, 1979], l'interpolation [YEH & YOON, 1981 ; KITANIDIS & VOMVORIS, 1983], la procédure multi-échelle [LAROCQUE, 1997] et bien d'autres [SUN, 1994]. La technique la plus usitée est la **zonation** : le domaine étudié est subdivisé en plusieurs zones (ou sous-régions) auxquelles est affectée une valeur inconnue et uniforme de la variable à estimer (dans notre cas la conductivité hydraulique). Chacune de ces valeurs inconnues représentant un paramètre ajustable, le nombre d'inconnues (c'est-à-dire de paramètres) est donc égal au nombre de zones. L'extension spatiale de ces zones peut éventuellement être déterminée par les caractéristiques lithologiques ou géographiques du domaine étudié. Les erreurs introduites par cette méthode proviennent de l'uniformité de la valeur des paramètres dans chaque zone et de l'incertitude sur la géométrie de ces zones.

## 2.1.2 Information *a priori*

L'information *a priori* correspond à une information directe sur la variable inconnue du problème inverse. Dans le cas des modèles hydrogéologiques, elle consiste en des valeurs "locales" de conductivité hydraulique le plus souvent obtenues par interprétation d'essais de pompage et donc généralement disponibles en un nombre limité de points au sein de l'aquifère (de quelques unités à quelques dizaines). Après éventuelle "mise à échelle", ces informations complémentaires peuvent être prises en compte dans la procédure de calibration à l'aide d'un "critère de plausibilité" [NEUMAN, 1973], qui mesure la déviation entre les paramètres optimisés et les estimations *a priori* de ces paramètres. De cette manière, non seulement un maximum d'information est introduit dans le processus de calibration, mais surtout le processus d'inversion est stabilisé et le problème est rendu non-unique [WEISS & SMITH, 1998].

## 2.2 Techniques de résolution du problème inverse

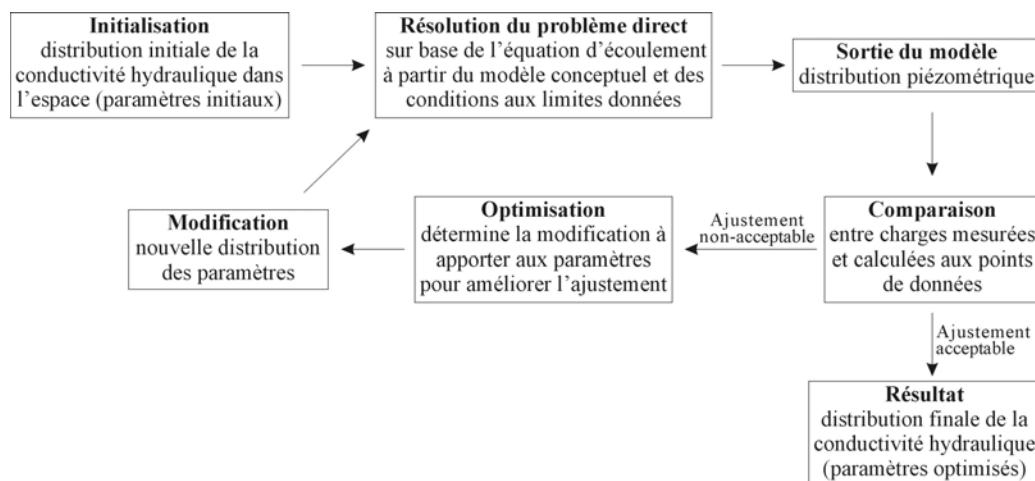
La technique de calibration des modèles d'écoulement souterrain la plus usitée à ce jour est la traditionnelle méthode par essais-et-erreurs [ANDERSON & WOESSNER, 1992] où, pour une même sollicitation du système, la répartition spatiale et les valeurs de conductivité hydraulique du milieu poreux sont modifiées manuellement jusqu'à ce que l'on atteigne, en chaque point d'observation, un bon ajustement entre les piézométries calculée et mesurée. Cette méthode manuelle est longue, fastidieuse, subjective et dépend largement de l'expérience de l'hydrogéologue, ce qui a motivé les chercheurs à développer des techniques de calibration automatique.

Les techniques de calibration automatique (ou de modélisation inverse) ont été étudiées intensivement au cours des trente dernières années. La littérature s'y rapportant est très vaste et variée. YEH [1986] et MCLAUGHLIN & TOWNLEY [1996] proposent des synthèses complètes des nombreuses méthodes existantes de résolution du problème inverse en hydrogéologie. L'historique du développement de ces différentes approches est donné par LAVENUE [1998] et DE MARSILY & *al.* [1999]. NEUMAN [1973] a regroupé toutes les méthodes de résolution du problème inverse en deux catégories : les méthodes inverses directes et les méthodes inverses indirectes.

Les **méthodes inverses directes** [NELSON, 1960, 1961, 1968 ; Emsellem & de Marsily, 1971 ; NEUMAN, 1973] nécessitent la connaissance des charges hydrauliques en tout point du domaine ainsi que leurs dérivées première et seconde. Dès lors, l'équation générale

d'écoulement qui est une équation différentielle partielle du second ordre, devient une équation différentielle partielle du premier ordre dans laquelle les valeurs de conductivité hydraulique sont les inconnues. En pratique, les charges hydrauliques étant généralement disponibles en nombre limité, les données manquantes sont estimées par interpolation. Une erreur associée à cette interpolation est alors introduite sous forme d'un terme d'erreur dans l'équation générale d'écoulement régissant le système, qui est ensuite minimisée par le choix des paramètres. Cette approche est qualifiée de "directe" puisque le problème est linéaire et peut être résolu directement de manière non-itérative. Elle est peu utilisée en raison de la grande sensibilité de la solution obtenue aux erreurs dans les charges interpolées. De plus, ces méthodes ont été peu à peu abandonnées depuis une dizaine d'années au profit des techniques inverses indirectes en raison de la maturation de ces dernières et du développement intense des ordinateurs.

Les **méthodes inverses indirectes** tentent, par modification des paramètres hydrogéologiques initiaux, de minimiser un critère basé sur la différence entre charge hydraulique mesurée et calculée aux divers points d'observation. Les paramètres optimisés produisent ainsi le meilleur ajustement des valeurs de charge pour le modèle conceptuel donné. La figure 2.1 présente l'approche générale utilisée par les méthodes inverses indirectes.



**Figure 2.1 :** Approche générale utilisée par les méthodes inverses indirectes [d'après LAVENUE, 1998]

L'avantage de ces approches inverses indirectes par rapport aux approches inverses directes est que la formulation du problème inverse est applicable aux situations pour lesquelles les observations de charges hydrauliques sont peu nombreuses et mal réparties. Bien que plus fastidieuses que les méthodes directes, les méthodes indirectes conduisent généralement à de meilleures solutions [CARRERA & NEUMAN, 1986 a, b, c].

Un grand nombre de méthodes indirectes de résolution du problème inverse ont été développées. Les différences principales entre toutes ces techniques proviennent de la conceptualisation adoptée pour le champ des paramètres (distinction entre méthodes déterministes et méthodes bayésiennes) et de la formulation des équations reliant ce champ des paramètres à la distribution des charges hydrauliques (distinction entre méthodes linéaires et méthodes non-linéaires).

### Méthodes déterministes et méthodes bayésiennes

Les hypothèses faites sur le champ de conductivité hydraulique se basent sur la conceptualisation que le modélisateur a de ce champ inconnu. Il existe deux interprétations distinctes : le premier point de vue, qualifié de **déterministe**, considère le champ réel des paramètres comme unique et inconnu. L'incertitude associée à ce champ provient de notre incapacité à effectuer des mesures précises de la propriété, conduisant à une erreur d'estimation considérée comme aléatoire et de distribution normale. Au contraire, les méthodes **bayésiennes** considèrent les paramètres comme des fonctions aléatoires : le champ réel des paramètres est une réalisation du champ aléatoire de moyenne constante connue et de covariance imposée. McLAUGHLIN & TOWNLEY [1996] ont examiné ces deux points de vue de manière rigoureuse, ainsi que leurs implications sur la formulation du problème inverse.

### Méthodes linéaires et méthodes non-linéaires

Une autre distinction faite sur les nombreuses méthodes indirectes réside dans la formulation des équations reliant le champ des paramètres à la distribution des charges hydrauliques. Cette distinction permet de scinder les méthodes indirectes en deux catégories : les méthodes linéaires et non-linéaires.

Dans les méthodes **linéaires** [KITANIDIS & VOMVORIS, 1983 ; HOEKSEMA & KITANIDIS, 1984 ; RUBIN & DAGAN, 1987a, b], un modèle géostatistique décrivant la variabilité spatiale du champ de conductivité hydraulique est proposé. Dans l'équation différentielle de l'écoulement utilisée pour relier la variabilité spatiale de la charge à la variabilité spatiale du logarithme de la conductivité hydraulique, les champs de charge hydraulique et du logarithme de la conductivité hydraulique sont chacun décomposés en une composante déterministe correspondant à un champ de valeurs moyennes et en une composante stochastique représentée par un champ de perturbations constitué de faibles variations autour de la valeur moyenne en chaque élément. Une relation stochastique linéaire est alors établie entre les perturbations de charge et du logarithme de la conductivité hydraulique, qui permet de déduire les relations entre leurs moments (covariances simples et croisées). Les paramètres

géostatistiques de la covariance du champ du logarithme de la conductivité hydraulique (variance ou palier et longueur de corrélation) sont alors optimisés par une méthode de Gauss-Newton, en comparant les valeurs du logarithme de la conductivité hydraulique mesurées et estimées par cokrigage aux points de données. La distribution de conductivité hydraulique du modèle est ensuite obtenue par cokrigage à partir des paramètres géostatistiques optimisés.

Les méthodes **non-linéaires** utilisent une procédure itérative pour optimiser les paramètres : les étapes de résolution de l'équation d'écoulement, de vérification de l'ajustement entre la piézométrie calculée et observée et de modification du champ des paramètres pour améliorer l'ajustement sont répétées jusqu'à ce que la différence entre les charges mesurées et calculées atteigne un minimum (généralement de l'ordre de grandeur des erreurs de mesure dans les charges). Le critère à minimiser, souvent appelé **fonction objectif**, est typiquement exprimé soit par une fonction pondérée au sens des moindres carrés (*weighted least square function*), soit par une fonction de vraisemblance (*likelihood function*). Ce sont les dérivées de la fonction objectif par rapport aux paramètres de conductivité hydraulique qui guident les modifications à apporter au champ de conductivité hydraulique. ZIMMERMAN & al. [1998] ont comparé les résultats obtenus par diverses méthodes de résolution du problème inverse sur des cas communs. Cet exercice a mis en évidence, entre autres choses, la supériorité des méthodes non-linéaires par rapport aux méthodes linéaires.

Parmi les diverses méthodes inverses indirectes non-linéaires existantes, on peut citer l'approche bayésienne du **maximum a posteriori** ou MAP [GAVALAS & al., 1976] qui considère les paramètres comme des fonctions aléatoires. Cette méthode cherche, par application de la loi de Bayes, à passer d'une loi de probabilité décrivant les paramètres *a priori* à une autre loi, dite *a posteriori* valable une fois les données d'observations disponibles. Elle tente ensuite de trouver le jeu des logarithmes de la conductivité hydraulique pour lequel la probabilité des logarithmes de la conductivité hydraulique *a posteriori* est maximum, ce qui revient à minimiser de façon itérative le critère des moindres carrés généralisé (équation 2.3), dont le premier terme  $C_1$  représente le critère d'ajustement du modèle aux données de charges, tandis que le second terme  $C_2$ , appelé critère de plausibilité, représente les écarts aux espérances *a priori* des paramètres :

$$\Phi = C_1 + C_2 = (\underline{h}' - \underline{h})^T \underline{\underline{Q}} (\underline{h}' - \underline{h}) + (\underline{Y}' - \underline{Y})^T \underline{\underline{P}} (\underline{Y}' - \underline{Y}) \quad (2.3)$$

où  $\underline{h}'$  représente les observations de charge hydraulique aux points de mesure ;  
 $\underline{h}$ , les hauteurs piézométriques résultant de la résolution du problème direct ;  
 $\underline{Y}'$ , l'information *a priori* sur les paramètres ;



$\underline{Y}$ , la valeur des paramètres estimés ;

$\underline{Q}$ , la matrice de covariance des erreurs de mesure des charges ;

$\underline{P}$ , la matrice de covariance des erreurs de mesure des paramètres.

Une autre approche est celle du **maximum de vraisemblance** ou ML (*maximum likelihood*) [CARRERA & NEUMAN, 1986a, b, c]. Cette approche déterministe tente de trouver les paramètres les plus probables compte tenu des données disponibles, c'est-à-dire ceux qui maximisent la probabilité de trouver, pour un certain jeu de paramètres, le jeu de données de charge hydraulique effectivement observé (appelée probabilité de vraisemblance des paramètres). Malgré le fait que ces deux approches MAP et ML possèdent des bases conceptuelles très différentes – la première est bayésienne et la seconde est déterministe –, elles conduisent à la définition de la même fonction objectif (équation 2.3) et dès lors, à des résultats pratiques fort proches. De plus, elles nécessitent toutes les deux de paramétrer fortement le domaine étudié par la technique de zonation. L'approche des **points pilotes** [DE MARSILY, 1978 ; CERTES & DE MARSILY, 1991 ; LAVENUE & PICKENS, 1992 ; RAMARAO & *al.*, 1995 ; LAVENUE & *al.*, 1995], méthode bayésienne et non-linéaire, permet au contraire de conserver la variabilité spatiale de la distribution de la transmissivité. Elle consiste à atteindre un estimateur sub-optimal du champ du logarithme de la transmissivité en modifiant progressivement l'*a priori* obtenu par krigeage par l'introduction de "points pilotes". Les points pilotes sont utilisés dans les équations du krigeage comme des points de données ordinaires, mais dont les valeurs sont des inconnues que l'on ajuste peu à peu pour caler le modèle. Ces valeurs aux points pilotes sont estimées par minimisation d'une fonction objectif ne faisant intervenir qu'un critère d'ajustement sur les données ponctuelles de charge. Les points pilotes sont introduits un à un en les positionnant aux points de sensibilité maximale (position qui permet de décroître le plus facilement la fonction objectif). La connaissance des valeurs additionnelles introduites aux points pilotes est propagée par krigeage au reste du domaine de la même façon que le serait une nouvelle donnée d'essai au puits. Le nombre de points pilotes choisi donne le nombre d'inconnues du problème. Cette méthode peut donc être vue comme une forme de paramétrisation, cohérente avec l'estimateur par krigeage.

Dans ce travail, la résolution du problème inverse est réalisée par le code d'inversion PEST [Parameter ESTimation ; DOHERTY & *al.*, 1994] dont l'approche dérive de l'estimation par maximum de vraisemblance. L'optimisation des paramètres par minimisation de la fonction objectif est réalisée par régression non-linéaire à partir de l'algorithme de Gauss-Marquart-Levenberg. Diverses autres techniques d'optimisation des paramètres existent [SUN, 1994], telles que la méthode modifiée de Gauss-Newton [COOLEY, 1977, 1982] ou la méthode du gradient conjugué [CARRERA & NEUMAN, 1986a, b, c]. Seuls les développements mathématiques relatifs à l'approche utilisée dans ce travail sont présentés.

## 2.3 Procédure d'optimisation des paramètres

La relation entre les paramètres  $\underline{Y}$  et les observations  $\underline{h}$  générées par le modèle est représentée par

$$\underline{h} = M(\underline{Y}) \quad (2.4)$$

où  $M$  est une fonction de  $\mathfrak{R}^n$  dans  $\mathfrak{R}^m$  déterminée par la constitution du modèle,  $n$  est le nombre de paramètres ajustables et  $m$  est le nombre d'observations.

Les systèmes décrits en hydrogéologie sont non-linéaires et nécessitent donc une résolution itérative. La procédure d'estimation étant itérative, un jeu initial de paramètres ajustables  $\underline{Y}_0$  est donc nécessaire en début de processus. Afin de générer un ensemble d'observations  $\underline{h}$  correspondant au vecteur  $\underline{Y}$  qui diffère légèrement de  $\underline{Y}_0$ , le processus non-linéaire décrit par l'équation 2.4 est linéarisé par l'approximation de Taylor [CARRERA & NEUMAN, 1986b] de la manière suivante :

$$\underline{h} = \underline{h}_0 + \underline{J}(\underline{Y} - \underline{Y}_0) \quad (2.5)$$

où  $\underline{J}$  est la matrice jacobienne<sup>(\*)</sup> ( $m \times n$ ) de  $M$ .

L'optimisation des paramètres conduit à minimiser la fonction objectif  $\Phi$  définie comme étant la somme pondérée du carré des écarts entre les observations expérimentales  $\underline{h}'$  et les observations  $\underline{h}$  générées par le modèle :

$$\Phi = \sum_{i=1}^m [w_i (h'_i - h_i)]^2 \quad \text{où } w_i \text{ est le poids attribué à la } i^{\text{ème}} \text{ observation} \quad (2.6)$$

Soit, en notation matricielle,

$$\Phi(\underline{Y}) = (\underline{h}' - \underline{h})^T \underline{Q} (\underline{h}' - \underline{h}) = (\underline{h}' - (\underline{h}_0 + \underline{J}(\underline{Y} - \underline{Y}_0)))^T \underline{Q} (\underline{h}' - (\underline{h}_0 + \underline{J}(\underline{Y} - \underline{Y}_0))) \quad (2.7)$$

avec  $\underline{Q}$ , la matrice diagonale ( $m \times m$ ) des pondérations, ayant comme éléments le carré des poids  $w_i$  attribués à chaque observation.

---

(\*) Le jacobien ou matrice jacobienne est l'équivalent de la notion de dérivée d'une fonction réelle par rapport à une variable, mais appliquée aux fonctions vectorielles de plusieurs variables :  $J_{ij} = \partial h_i / \partial Y_j$ ,  $i=1, \dots, m$ ;  $j=1, \dots, n$ .  $J_{ij}$  est donc la dérivée de la  $i^{\text{ème}}$  observation par rapport au  $j^{\text{ème}}$  paramètre. Les éléments de la matrice sont appelés coefficients de sensibilité.

La pondération permet d'augmenter l'importance de certaines observations par rapport aux autres au sein du processus d'optimisation. Les poids accordés aux observations sont inversement proportionnels à l'écart-type de ceux-ci, les plus grands poids étant attribués aux observations les plus "sûres". La pondération est fortement conseillée lorsqu'on travaille avec des observations de différents types (par exemple des hauteurs piézométriques et des flux) afin que les observations ayant des ordres de grandeurs plus élevés ne dominent pas le processus d'estimation.

Le vecteur  $\underline{Y}$  qui minimise  $\Phi$ , s'écrit :

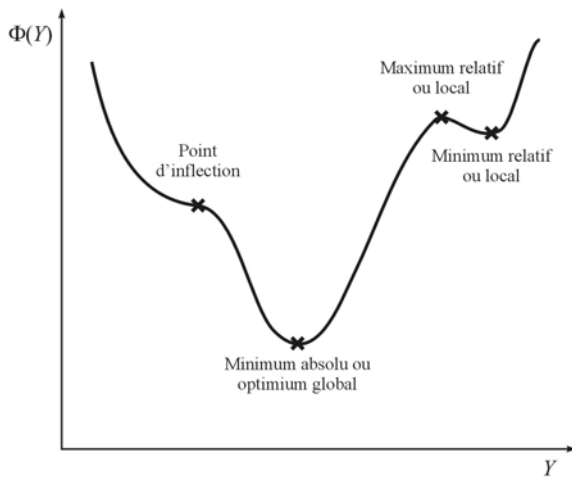
$$\underline{Y} = \underline{Y}_0 + \underline{u} \quad (2.8)$$

où  $\underline{u}$  est le vecteur de modification des paramètres qui s'écrit selon la formule de Gauss-Newton :

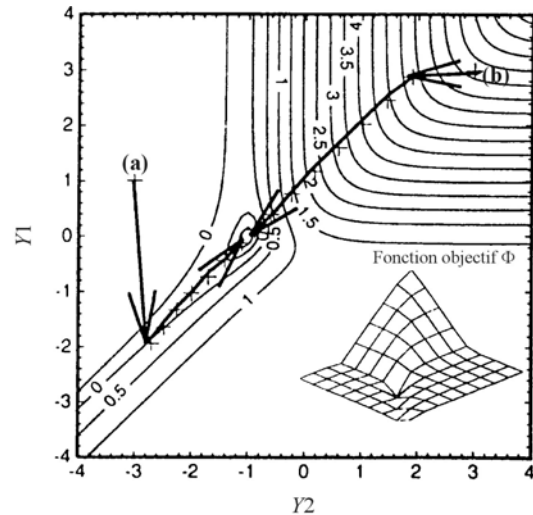
$$\underline{u} = (\underline{J}^T \underline{Q} \underline{J})^{-1} \underline{J}^T \underline{Q} (\underline{h}' - \underline{h}_0) \quad \text{appelée équation normale} \quad (2.9)$$

Théoriquement, la solution du problème est immédiatement connue. En pratique, c'est un peu différent car la fonction  $M$  a été linéarisée et constitue donc une approximation. Rien ne garantit donc que le vecteur  $\underline{Y}$  trouvé est celui qui minimise globalement la fonction objectif  $\Phi$ . La valeur de  $\Phi$  minimum est dès lors atteinte par itérations successives en modifiant progressivement la valeur des paramètres du vecteur  $\underline{Y}$ . Malheureusement, dans de nombreux cas de problèmes non-linéaires, outre le minimum global, la fonction objectif peut posséder des minimums locaux (figure 2.2). Il est donc intéressant de tester plusieurs jeux initiaux de paramètres. Le processus de convergence itérative vers une fonction objectif minimum est représenté graphiquement, à la figure 2.3, pour un problème à deux paramètres et considérant deux jeux de paramètres initiaux différents.

La convergence de la procédure d'estimation des paramètres peut être améliorée en optimisant la direction et la grandeur du vecteur de modification des paramètres  $\underline{u}$  et en le normant.



**Figure 2.2 :** Minimum global et minimums locaux d'une fonction objectif pour un problème à un paramètre  $Y$  [inspiré de HILL, 1992]



**Figure 2.3 :** Processus de convergence itérative vers une fonction objectif minimum pour un problème à deux paramètres  $Y_1$  et  $Y_2$ , pour deux jeux de paramètres initiaux (a) et (b) [tiré de POETER & HILL, 1997]

### 2.3.1 Direction optimale du vecteur $\underline{u}$

La convergence de nombreux problèmes d'estimation des paramètres peut être améliorée en ajustant, dans les premières étapes du processus d'estimation, le vecteur de modification des paramètres  $\underline{u}$  de manière à ce qu'il soit plus proche de la direction de plus grande pente  $-g$ . OLSTHOORN [1995] a montré que parmi les méthodes d'optimisation existantes, qui diffèrent selon leur façon de calculer la direction de descente, la méthode de Gauss-Marquardt-Levenberg est une des plus efficaces. Le gradient  $\underline{g}$  de la fonction objectif  $\Phi$  dans l'espace des paramètres, indique le sens de la plus grande variation de  $\Phi$ . Il est exprimé par :

$$\underline{g} = \underline{grad}\Phi \quad \text{où } g_i = \frac{\partial\Phi}{\partial b_i} \text{ est le } i^{\text{ème}} \text{ élément de } \underline{g} \quad (2.10)$$

L'angle formé par le vecteur  $\underline{u}$  et l'inverse du gradient  $\underline{g}$  de la fonction objectif ne peut être supérieur à  $90^\circ$ , sinon le mouvement le long de  $\underline{u}$  provoque une augmentation de la fonction objectif, ce qui est l'inverse de ce que l'on recherche. La méthode de Gauss-Marquardt-Levenberg tente d'ajuster le vecteur  $\underline{u}$  dans la direction opposée au gradient  $\underline{g}$ , en introduisant dans l'équation (2.9) un paramètre "Marquardt". Soit  $\alpha$ , le paramètre Marquardt (scalaire positif) et  $\underline{I}$ , la matrice identité ( $n \times n$ ), le vecteur  $\underline{u}$  est alors modifié de la manière suivante:

$$\underline{u} = \left[ \underline{J}^T \underline{Q} \underline{J} + \alpha \underline{I} \right]^{-1} \underline{J}^T \underline{Q} (\underline{h}' - \underline{h}_0) \quad (2.11)$$

On peut montrer que le gradient  $\underline{g}$  peut être exprimé par

$$-\underline{g} = 2 \underline{J}^T \underline{Q} (\underline{h}' - \underline{h}_0) \quad (2.12)$$

D'après les équations (2.11) et (2.12), plus le paramètre  $\alpha$  est grand, plus la direction de  $\underline{u}$  se rapproche de celle de  $-\underline{g}$  et quand  $\alpha$  est nul, l'équation (2.11) est équivalente à l'équation (2.9). Cependant, malgré le fait que  $-\underline{g}$  défini la direction de plus grande pente de la fonction objectif  $\Phi$ , on peut montrer (figure 2.3) que la direction de  $\underline{u}$  est préférable dans certaines situations pour lesquelles les paramètres sont fortement corrélés entre eux (phénomène d'"*hemstitching*"). Dès lors, il est préférable d'utiliser une valeur élevée du paramètre Marquardt pour les premières itérations d'optimisation, puis de diminuer sa valeur en cours de processus lorsque l'on approche la valeur optimum de la fonction objectif.

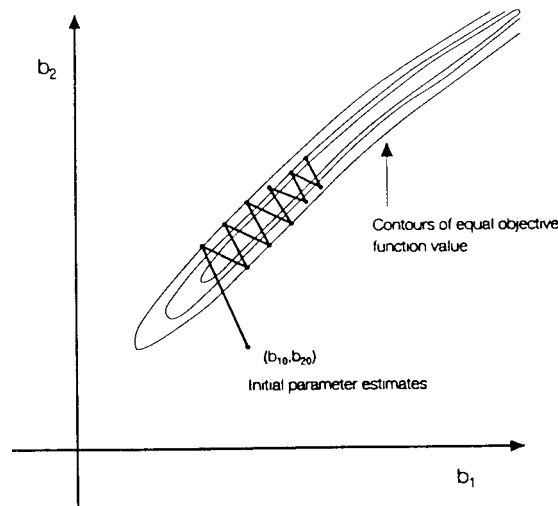


Figure 2.3 : Phénomène d'"*hemstitching*" pour des paramètres fortement corrélés entre eux [tiré de DOHERTY & al., 1994]

### 2.3.2 Grandeur optimale du vecteur $\underline{u}$

L'ajout du paramètre Marquardt dans l'équation normale produit l'effet désiré de faire pivoter le vecteur  $\underline{u}$  dans la direction de  $-\underline{g}$ . La direction du vecteur  $\underline{u}$  est donc favorablement modifiée, mais sa grandeur n'est pas optimale. C'est donc un multiple de  $\underline{u}$  qui sera ajouté au vecteur des paramètres initiaux  $\underline{Y}_0$  pour déterminer le vecteur des paramètres optimisés  $\underline{Y}$  :

$$\underline{Y} = \underline{Y}_0 + \beta \underline{u} \quad (2.13)$$

Le facteur multiplicatif  $\beta$  (paramètre de sous-relaxation ou *damping parameter*) le plus adapté à la convergence est calculé à partir des composantes de la matrice jacobienne et des

poids accordés aux observations [COOLEY, 1983]. Il permet de limiter la modification du vecteur  $\underline{Y}_0$ .

### 2.3.3 Normation

D'un point de vue numérique, il est préférable que tous les éléments de la matrice jacobienne  $\underline{J}$  soient du même ordre de grandeur afin que les erreurs d'arrondis n'altèrent pas certaines valeurs. Dans de nombreux problèmes et en particulier ceux impliquant plusieurs types d'observations et de paramètres d'ordre de grandeur très différents, une normation est donc réalisée par l'intermédiaire d'une matrice  $\underline{S}$  diagonale ( $n \times n$ ) pour laquelle le  $i^{\text{ème}}$  élément est défini par :

$$S_{ii} = (\underline{J}^T \underline{Q} \underline{J})_{ii}^{-1/2} \quad (2.14)$$

Le problème à résoudre et mathématiquement équivalent à l'équation (2.11) est alors :

$$\underline{S}^{-1} \underline{u} = \left[ (\underline{J} \underline{S})^T \underline{Q} (\underline{J} \underline{S}) + \alpha \underline{S}^T \underline{S} \right]^{-1} (\underline{J} \underline{S})^T \underline{Q} (\underline{h}' - \underline{h}_0) \quad (2.15)$$

Tous les éléments diagonaux de la matrice  $(\underline{J} \underline{S})^T \underline{Q} (\underline{J} \underline{S})$  sont égaux à l'unité. Mais l'ajout de la matrice  $\alpha \underline{S}^T \underline{S}$  les rend supérieurs à l'unité et généralement non égaux entre-eux. Le plus grand élément  $\lambda$  de cette dernière matrice diagonale, appelé paramètre "Marquardt Lambda", joue un rôle équivalent au paramètre Marquardt  $\alpha$  du problème non normé : il détermine l'importance de la composante suivant  $\underline{g}$  dans le calcul du vecteur  $\underline{u}$ .

## 2.4 Principe de la procédure suivie par le code PEST

### 2.4.1 Optimisation des paramètres

Le logiciel PEST conduit l'optimisation des paramètres par itérations successives en exécutant plusieurs fois le modèle d'écoulement à chaque itération. PEST résout tout d'abord le problème d'écoulement direct avec les paramètres initiaux  $\underline{Y}_0$  définis par l'utilisateur. La fonction objectif  $\Phi$  associée est alors calculée. Si la valeur de  $\Phi$  est nulle, le processus s'arrête. Dans le cas contraire, PEST entame la première itération d'optimisation. Chaque itération débute par le calcul de la matrice jacobienne  $\underline{J}$ . Ensuite, le paramètre Marquardt Lambda  $\lambda$  le plus adapté est recherché :

- l'équation (2.11) permettant d'obtenir le vecteur  $\underline{u}$  est résolue en utilisant la valeur initiale de  $\lambda$  définie par l'utilisateur. Le vecteur  $\underline{Y}_0$  est alors modifié selon l'équation (2.8) et le vecteur des paramètres obtenus  $\underline{Y}$  est introduit dans le modèle d'écoulement. La fonction objectif correspondante est ensuite évaluée.
- une série de sous-itérations est alors entamée en testant plusieurs valeurs de  $\lambda$ . On tente ainsi de trouver la valeur de  $\lambda$  qui minimise la fonction objectif pour la même matrice jacobienne, c'est-à-dire au sein de la même itération d'optimisation.

L'itération suivante débute par le calcul du jacobien en utilisant, comme nouveau vecteur des paramètres initiaux  $\underline{Y}_0$ , le vecteur des paramètres estimés à l'itération précédente. Les valeurs des paramètres sont ainsi optimisées par itérations successives.

## 2.4.2 Calcul de la matrice jacobienne

Au début de chaque itération d'optimisation, la matrice jacobienne de  $M$  est estimée au voisinage du nouveau jeu des paramètres. Le calcul de cette matrice nécessite la détermination des dérivées partielles de chacune des composantes de  $M$ , c'est-à-dire les dérivées des observations par rapport aux paramètres ajustables. Le logiciel PEST étant universel et donc utilisable avec toutes sortes de modèles autres que les modèles d'écoulement, les dérivées ne sont pas calculées à partir de formules spécifiques au modèle. Le logiciel PEST propose deux méthodes pour évaluer ces dérivées en incrémentant les paramètres et en calculant les observations associées :

- une méthode rapide, ne nécessitant pour chaque itération d'optimisation qu'une seule exécution du modèle d'écoulement par paramètre ajustable, mais peu précise car calculée uniquement sur deux points (*forward differences*) ;
- une méthode plus lente, nécessitant deux exécutions du modèle par paramètre ajustable pour chaque itération, mais beaucoup plus précise car la dérivée est calculée sur base de trois valeurs d'un même paramètre (un incrément positif et un incrément négatif) et des observations correspondantes (*central differences*), plutôt que deux.

En pratique, on combine les deux méthodes. La première méthode est utilisée au début de la procédure d'optimisation afin de converger rapidement vers la solution. Par après, la seconde méthode prend le relais afin d'assurer la précision de la convergence.

## 2.4.3 Critères d'arrêt

Deux types de critères d'arrêt de la procédure d'optimisation sont à envisager : l'arrêt d'une itération d'optimisation et l'arrêt global du processus.

### Critère d'arrêt d'une itération d'optimisation

Plusieurs sous-itérations sont engendrées au sein d'une même itération d'optimisation : pour différentes valeurs du paramètre Marquardt Lambda  $\lambda$ , le logiciel PEST calcule un nouveau vecteur des paramètres  $\underline{Y}$  et la valeur de la fonction objectif correspondante. L'arrêt d'une itération d'optimisation et le passage à l'itération suivante est réalisée si une des conditions suivantes est remplie :

- le rapport entre la fonction objectif en cours et en début d'itération est inférieur ou égal à une valeur donnée ;
- la réduction relative de la valeur de la fonction objectif calculée pour deux paramètres Marquardt Lambda consécutifs est inférieure à une valeur donnée ;
- l'augmentation et la diminution de la valeur du paramètre Marquardt Lambda conduit à une augmentation de la fonction objectif ;
- le nombre maximum de paramètres Marquardt Lambda a été testé.

### Critère d'arrêt du processus

Plusieurs critères d'arrêt de l'ensemble du processus d'estimation, basés sur l'analyse de l'évolution de la fonction objectif et sur le comportement des paramètres ajustables, existent. Le processus d'estimation s'arrête lorsque :

- la valeur de la fonction objectif atteint zéro (cette condition est très rarement, voir jamais rencontrée) ;
- la fonction objectif ne diminue pas ou très peu après un nombre donné d'itérations d'optimisations successives ;
- les paramètres ajustables ne sont que très faiblement modifiés après un nombre donné d'itérations d'optimisations successives ;
- le nombre maximum d'itérations du processus d'estimation est atteint, indépendamment de la valeur de la fonction objectif et l'estimation des paramètres ajustables.

Dans les trois premiers cas, l'arrêt du processus signifie que les paramètres ajustables ont convergé vers leurs valeurs minimum, mais ne signifie pas que l'optimum global est atteint. En effet, le processus peut s'arrêter à un minimum local puisque de faibles variations des paramètres ne permettent pas de s'en éloigner. Il est dès lors toujours intéressant de tester plusieurs jeux de paramètres initiaux différents.

Outre la valeur de la fonction objectif minimisée et celles des paramètres optimisés, d'autres résultats sont calculés par le logiciel PEST qui permettent de déceler d'éventuelles corrélations entre les paramètres estimés ; ils sont définis à l'annexe A. HILL [1998] fournit de nombreux conseils généraux et expose la méthodologie à suivre pour appliquer de manière efficace et fiable la calibration automatique des modèles d'écoulement.



## 2.5 Applications pratiques

La procédure de calibration par essais-et-erreurs décrite plus haut est une approche indirecte pour laquelle le processus d'ajustement des paramètres est manuel. L'avantage fondamental des méthodes de calibration automatique, par rapport à la technique manuelle, est leur capacité à calculer les valeurs des paramètres qui produisent le meilleur ajustement des valeurs de charges. Ces approches automatiques permettent dès lors au modélisateur de comparer **objectivement** des scénarios alternatifs de systèmes complexes. En effet, des paramètres optimisés non-réalistes d'un point de vue géologique ou un ajustement médiocre des valeurs de charge indiquent souvent que le modèle conceptuel ne représente pas correctement l'aquifère réel ou que les données ne contiennent pas assez d'information pour estimer certains de ces paramètres [POETER & HILL, 1996].

Dans la littérature, on retrouve de nombreuses applications de ce type de méthode de calibration automatique au cas de grands bassins versants. Dans ces applications, seule l'hétérogénéité à grande échelle est considérée (les hétérogénéités locales ne sont pas prises en compte) : le domaine étudié est subdivisé en grandes zones de valeurs de conductivité hydraulique uniforme (souvent moins de dix). Dans le cas des sites de captage et des sites de décharge dont la superficie est beaucoup moins importante et les forages souvent peu nombreux, la modélisation (telle que fréquemment appliquée en Région Wallonne) vise en général à déterminer les hétérogénéités locales en vue de délimiter des zones de protection, d'optimiser des débits de pompage, etc. Or, en comparant la calibration manuelle et la calibration automatique (logiciel PEST) de modèles d'écoulement déterministes sur différents sites [RENTIER & al, 1999 ; GUYOT, 2000], il a été mis en évidence que dans le cas de la reconnaissance d'hétérogénéités locales, la détermination de la répartition spatiale est autant si pas plus importante que l'estimation des paramètres proprement dite.

La méthode stochastique de délimitation des zones de protection proposée dans ce travail pose le problème inverse dans un cadre stochastique : on va rechercher non pas un champ optimal, mais un ensemble de champs possibles, équiprobables, tous acceptables comme solution (on s'écarte ainsi de la recherche à tout prix d'une solution unique pour un problème posé au sens de HADAMARD [1952]). Le problème inverse sera donc résolu par la méthode de calibration automatique exposée plus haut pour un grand nombre de réalisations du champ de conductivité hydraulique de répartition spatiale connue (sur base des statistiques spatiales de la propriété).