



**HAL**  
open science

# Modélisation des aquifères complexes - Prise en compte de la zone non saturée et de la salinité. Calcul des intervalles de confiance

Dominique Thiéry

► **To cite this version:**

Dominique Thiéry. Modélisation des aquifères complexes - Prise en compte de la zone non saturée et de la salinité. Calcul des intervalles de confiance. *Hydrogéologie*, 1993, 1993 (4), pp. 325-336. hal-01062466

**HAL Id: hal-01062466**

**<https://brgm.hal.science/hal-01062466>**

Submitted on 9 Sep 2014

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Modélisation des aquifères complexes. Prise en compte de la zone non saturée et de la salinité. Calcul des intervalles de confiance

*Modelling of complex aquifers  
with unsaturated zone and salinity.  
Calculation of confidence limits*

Dominique THIERY\*

Mots-clés : Modèle 3 dimensions, Nappe eau, Zone non saturée, Salinité, Mécanisme écoulement

## Résumé

Cet article montre comment modéliser efficacement en 3 dimensions, avec un schéma à différences finies, des aquifères complexes, en tenant compte des écoulements à travers la zone non saturée et des variations spatiales et temporelles de la densité du fluide. Il montre également comment il est possible, par une analyse de sensibilité d'assortir d'un intervalle de confiance les prévisions émises en utilisant le modèle. De nombreux exemples d'application sont présentés pour illustrer la diversité des problèmes qui peuvent être résolus.

## Abstract

This paper demonstrates the efficient 3-D modelling of complex aquifers, taking into consideration the flow through the unsaturated zone and variations of fluid density in space and time, using a finite differences approach. The calculation of confidence limits for predictions simulated by the model is also presented. Several examples are given to illustrate the diversity of problems which can be solved.

---

## Introduction

---

Les premiers modèles de calcul des écoulements dans les systèmes aquifères sont apparus il y a une vingtaine d'années. A cette époque les modèles étaient le plus souvent monocouches ou bicouches (rarement tridimensionnels), et étaient applicables uniquement aux aquifères classiques, c'est-à-dire aux écoulements d'eau pure en zone saturée. Parallèlement, des modèles de calcul en zone non saturée sont apparus, essentiellement monodimensionnels dans la direction verticale, et avec des échelles de temps de l'ordre de la minute ou de l'heure, au lieu

de l'année ou la dizaine d'années pour les aquifères. Les écoulements dans les aquifères côtiers étaient modélisés de manière simplifiée en monocouche, en négligeant les phénomènes de mélange entre l'eau douce et l'eau salée [Bonnet *et al.*, 1974]. D'autre part, tous ces modèles étaient calés manuellement, c'est-à-dire par essais-erreur, ce qui était laborieux. Les problèmes d'environnement et de stockage ont rendu nécessaire la modélisation de systèmes beaucoup plus complexes avec, par exemple, le couplage de la zone saturée et de la zone non saturée en 3D, la modélisation d'aquifères profonds multicouches avec prise en compte de la variation de densité du fluide, l'exploitation de lentilles d'eau douce avec effet de coning de l'eau salée sous-jacente... D'autre part, les exigences de qualité exigent le plus souvent

\* BRGM, Direction de la recherche DR/HYT, BP 6009, 45060 Orléans Cedex 2.

d'assortir d'un intervalle de confiance les prévisions émises avec un modèle de simulation, ce qui nécessite une analyse de sensibilité. Le domaine d'application du modèle MARTHE du BRGM [Thiéry, 1990b, 1993b] a donc été étendu pour lui permettre, en plus des écoulements classiques en aquifères, de modéliser les écoulements complexes en zone non saturée et à densité variable. D'autre part, des procédures de calage automatique et d'analyse de sensibilité lui ont été intégrées. Malgré cette sophistication, le logiciel MARTHE, tout en fonctionnant sur stations de travail, est opérationnel sur les micro-ordinateurs. Cet article en 3 parties présente les méthodes originales de calcul utilisées pour les écoulements en zone non saturée, les écoulements à densité variable et pour l'analyse de sensibilité ; elles sont illustrées par des exemples d'applications.

## 1. - Ecoulements en zone non saturée

### 1.1. - Equation générale

On fait les hypothèses suivantes :

- écoulement isotherme ;
- sol non gonflant (la porosité est constante au cours du temps) ;
- fluide incompressible ;
- perméabilité à l'air infinie, d'où une pression de l'air égale à la pression atmosphérique.

Avec ces hypothèses, l'équation générale de l'écoulement s'écrit :

$$\text{div} [K \text{ Grad } H] = S_s \frac{\partial H}{\partial t} + q \quad (1)$$

avec :

- H = charge hydraulique au point x, y, z
- q = densité volumique de flux entrant (infiltration, injection) ou sortant (pompage) [T<sup>-1</sup>]
- S<sub>s</sub> = terme d'emménagement spécifique [L<sup>-1</sup>]
- K = tenseur de perméabilité à l'eau (diagonalisé) [LT<sup>-1</sup>]

### 1.2. - Discrétisation

La discrétisation se fait par différences finies avec une méthode implicite pure. En établissant l'équation d'équilibre entre la maille de calcul et les six mailles voisines, on obtient [cf. Thiéry, 1993a] :

$$\sum_{i=1}^6 K_i \cdot A_i \cdot (H_i - H_c) / d_i + Q_{\text{ext}} = \text{STO} / dt \quad (2)$$

avec :

- c = indice de la maille de calcul (au centre)
- i = une des 6 directions : nord, sud, est, ouest, haut et bas
- A<sub>i</sub> = aire d'échange entre 2 mailles
- d<sub>i</sub> = distance au nœud voisin dans la direction i
- K<sub>i</sub> = perméabilité équivalente dans la direction i
- Q<sub>ext</sub> = débit extérieur (terme source)
- STO = stockage d'eau dans la maille
- dt = durée du pas de temps

La perméabilité est fonction de la pression h :

$$K = f(h) = f(H - z)$$

avec :

- h = pression (exprimée en hauteur d'eau douce)
- z = altitude (positive vers le haut)

Le coefficient d'échange entre deux mailles adjacentes résulte de la moyenne pondérée des deux perméabilités selon une moyenne harmonique, une moyenne géométrique [comme conseillé par Vaucelin *et al.*, 1979], ou un schéma « upstream » (amont). Les pas de temps de calcul sont déterminés automatiquement de façon à assurer une convergence optimale. Ils sont indexés sur les variations de saturation dans les mailles et sur la précision du bilan.

Le terme de stockage est constitué de deux composantes :

- un terme proportionnel à la variation dθ de teneur en eau,
- un terme provenant de la compressibilité, proportionnellement à l'état de saturation θ/θ<sub>s</sub>.

$$\text{STO} = \text{VG} \cdot [d\theta + (\theta/\theta_s) \cdot S_s \cdot DH] / dt \quad (3)$$

avec :

- VG = volume géométrique de la maille
- θ = teneur en eau volumique
- θ<sub>s</sub> = teneur en eau à saturation = porosité

### 1.3. - Linéarisation

L'équation d'équilibre de chaque maille est non linéaire. Plusieurs manières de prendre en compte cette non-linéarité sont proposés par Cooley [1983] ou plus récemment Thiéry [1988, 1990a], Celia *et al.* [1990], Ross [1990] et Kirkland *et al.* [1992]. La méthode que nous avons choisie est décrite par Thiéry [1988]. C'est une méthode itérative (avec sous-relaxation) qui est inconditionnellement stable même avec de grands pas de temps et qui permet d'obtenir des bilans parfaitement équilibrés. L'avantage sur la méthode proposée par Cooley [1983] est que notre méthode est indépendante des relations caractéristiques du sol pression-teneur en eau, perméabilité. Les perméabilités utilisées dans l'équation sont les estimations les plus récentes au cours du processus itératif et elles correspondent à la fin du

pas de temps. La variation d'emmagasinement est écrite sous forme discrétisée analogue à un coefficient d'emmagasinement spécifique : la capacité capillaire  $C^k$  obtenue après l'itération  $k$  s'écrit :

$$C^k = [\theta^k(t) - \theta(t - dt)] / [H^k(t) - H(t - dt)] \quad (4)$$

Elle permet de transformer la variation de teneur en eau  $d\theta$  de l'expression du stockage (3) en variation de charge :

$$d\theta^{k+1} = C^k \cdot [H_c - H(t - dt)]$$

L'équation (2) relative à chaque maille  $c$  se transforme alors en une équation algébrique.

### 1.4. - Résolution

Quatre types de conditions aux limites sont possibles :

2 conditions classiques :

- potentiel imposé : charge imposée, pression imposée ou teneur en eau imposée (ce qui est équivalent pour le calcul)

- condition de flux nul (limite étanche)

et 2 conditions spécifiques :

- surface de suintement

- gradient de charge unitaire

Pour un maillage comprenant  $N$  mailles, on obtient - à chaque itération - un système linéaire de  $N$  équations. Ce système linéaire est symétrique ; il génère une matrice symétrique de dimension  $N \times N$ , très creuse, ne présentant que 7 diagonales : le centre et les 6 directions nord, sud, est, ouest, haut et bas. Ce système est résolu très efficacement par une méthode de gradients conjugués avec pré-conditionnement [Hill, 1990a et b ; Thiéry, 1993b] spécialement adaptée à ce type de matrice et ne nécessitant que peu de mémoire. Pour tenir compte du caractère fortement non linéaire du système d'équation, on applique, après la résolution matricielle, un coefficient de sous-relaxation pour garantir la stabilité des calculs.

### 1.5. - Exemples d'application

#### 1.5.1. - Ecoulement à travers la berge d'un cours d'eau

C'est le test n° 1 décrit par Cooley [1983] relatif à un massif poreux cubique de 10 m de côté. Une charge de 10 m est imposée sur la limite de gauche et une charge de 2 m sur la limite de droite qui peut présenter une surface de suintement. Les relations caractéristiques du sol sont définies par :

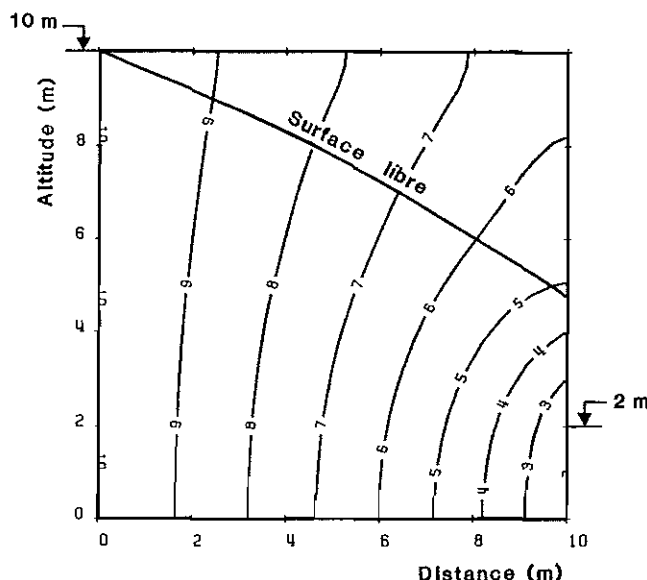


Fig. 1. - Ecoulement à travers la berge d'un cours d'eau. Isovaleurs de charge (m) (water flow through a river bank).

$$h/h_t = [(\theta_s - \theta) / (\theta - \theta_t)]^{b_t}$$

$$K/K_s = [(\theta - \theta_t) / (\theta_s - \theta_t)]^{b_k}$$

$$K/K_s = [(1 + (h/h_t)^{1/b_t})^{-b_k}]$$

avec les valeurs suivantes (en m et m/s) :

$$h_t = 1.778 ; b_t = 0.25 ; b_k = 4 ; K_s = 10^{-2}$$

La figure 1 présente les charges calculées et la surface libre. On voit apparaître une surface de suintement sur la surface gauche de l'altitude 2 m à l'altitude de 4,8 m.

#### 1.5.2. - Exemple n° 2 - Berge stratifiée

C'est le test n° 4 décrit par Cooley [1983] relatif à l'écoulement à travers la berge d'un cours d'eau, formée de 2 couches perméables séparées par une couche 100 fois moins perméable. Une charge de 26 m est imposée sur la limite droite (et de 0 m au fond du cours d'eau, à gauche). Les lois caractéristiques sont identiques à celles de l'exemple n° 1 (test n° 1) mais avec les paramètres suivants (en m et m/s) :

Aquifères :  $h_t = 2.115 ; b_t = 0.25 ; b_k = 4 ; K_s = 100$

Semi-perméable :

$$h_t = 4.472 ; b_t = 0.50 ; b_k = 4 ; K_s = 0.1$$

La figure 2 présente les charges calculées en régime permanent ainsi que la surface libre. On voit apparaître une petite surface de suintement en bas de l'aquifère inférieur (sur une hauteur inférieure à 1 m). Dans la formation semi-perméable, on ob-

avec :

$$F = \sum_i T_i \cdot d_i \cdot (z_i - z_c) \quad (10)$$

$$E = dx \cdot dy \cdot dz \cdot S_s \cdot h_p / dt$$

$A_i, A_c, B = \text{constantes}$

### Résolution

Le système d'équations se résout classiquement en pression par la méthode des gradients conjugués. De façon à obtenir un système d'équation mieux conditionné, il est préférable, comme le préconise Frind [1982], d'utiliser une résolution en charges d'eau douce plutôt qu'en pression. Cette manière de procéder permet d'obtenir davantage de précision dans le calcul des débits et elle a, en outre, l'avantage de permettre une transition logique entre les simulations avec et sans prise en compte des variations de densité. On définit la charge d'eau douce  $H_d$  par  $H_d = h + z$ . L'équation d'équilibre, écrite en terme de  $H_d$ , est inchangée à part la définition de  $F$  qui devient elle aussi mieux conditionnée sous la forme :

$$F = \sum_i T_i (d_i - 1) \cdot (z_i - z_c)$$

Après résolution en pression ou en charge d'eau douce, il faut calculer les charges réelles  $H = z + h/d$  pour vérifier les conditions de dénoie-ment, de captivité ou de débordement de la nappe.

### 2.3. - Calcul des densités

La densité du fluide est déterminée à partir de la concentration  $C$  en soluté suivant une relation  $\rho = f(C)$ , à température constante. La concentration est calculée par résolution de l'équation du transport. Cette équation fait intervenir les débits d'échange entre mailles qui sont calculés par la loi de Darcy.

#### Discrétisation

En discrétisant cette équation en différences finies, on obtient une équation en flux massique du type :

$$STOM = CONV + DISPER + FEXT$$

avec :

STOM = flux massique de stockage

CONV = convection

DISPER = dispersion (isotrope)

FEXT = flux massique provenant de l'extérieur

Les termes s'explicitent de la manière suivante :

$$STOM = [\theta (C - C_p) + S_s (C \cdot h - C_p \cdot h_p)] \cdot dx \cdot dy \cdot dz / dt$$

$$CONV = \sum_{i=1}^6 \epsilon_i \cdot Q_i \cdot C_i + \left[ \sum_{i=1}^6 (1 - \epsilon_i) \cdot Q_i \right] \cdot C$$

$$DISPER = \sum_{i=1}^6 dy \cdot dz \cdot \theta_i \cdot D_i \cdot (C_i - C) / d_i$$

$$FEXT = \epsilon_{ext} \cdot Q_{ext} \cdot C_{ext} + (1 - \epsilon_{ext}) \cdot Q_{ext} \cdot C$$

avec :

$p$  = indice d'une valeur en début de pas de temps (c'est-à-dire d'une valeur du pas de temps précédent)

$ext$  = indice d'une valeur extérieure

$d_i$  = distance dans la direction  $i$

$dx$  = dimension de la maille dans la direction  $i$

$dy, dz$  = dimensions des mailles dans les deux directions perpendiculaires à la direction  $i$

$\epsilon_i$  = index :  $\begin{cases} +1 & \text{si } Q_i > 0 \\ 0 & \text{si } Q_i \leq 0 \end{cases}$

On obtient donc, pour chaque maille, une équation qui peut se mettre sous la forme :

$$\sum_{i=1}^6 a_i \cdot C_i + b \cdot C = e$$

Le système d'équations obtenu est linéaire, si on suppose  $Q_i$  connu, mais il n'est pas symétrique, à cause des termes  $\epsilon_i$  qui dépendent des signes des débits.

#### Conditions aux limites

Il y a 2 types de conditions aux limites possibles :

- Concentration imposée

Le modèle calculera donc le flux massique qu'il faut injecter ou extraire du domaine pour maintenir cette concentration. Cette condition à la limite correspond, par exemple, à une limite bordée par la mer, si on est sûr que le débit va de la mer vers l'intérieur du modèle (et s'il n'y a pas de dispersion).

- Flux massique imposé (ou nul)

C'est un flux massique entrant, qui correspond à un apport de soluté, par un débit provenant de l'extérieur. En pratique, ce flux massique est imposé sous forme de la concentration en soluté du fluide entrant. Cette condition à la limite correspond, par exemple, à un aquifère bordé par la mer ou par un lac (bien mélangé) ou bien à un apport de soluté par la recharge.

Tabl. I. - Caractéristiques des exemples de calculs avec densité  
 (parameters used in calculating the examples, including density)

	Densité maximale	Épaisseur modélisée m	Extension latérale m	Perméabilité m/s	Porosité %	Diffusion m <sup>2</sup> /s	Diffusion intrinsèque m <sup>2</sup> /s	P = Permanent T = Transitoire	Coefficient de sous-relaxation du modèle
Biseau salé (Henry)	1.025	1.00	2.00	1.00 10 <sup>-2</sup>	35	6.6 10 <sup>-6</sup>	2.31 10 <sup>-6</sup>	T	1.00
Dôme de sel (Herbert)	1.200	300	900	9.81 10 <sup>-6</sup>	30	3.33 10 <sup>-6</sup>	1.00 10 <sup>-6</sup>	P	0.20
Courant convection (Elder)	1.200	150	600	4.75 10 <sup>-6</sup>	10	3.565 10 <sup>-6</sup>	3.565 10 <sup>-7</sup>	T	0.70
Ile de Malte (Gutierrez)	1.025	300	22 000	variable	-			P	0.01

## Résolution

Le système non symétrique obtenu peut se résoudre :

- de manière itérative (par la méthode de Gauss Seidel)
- par gradients conjugués (non symétriques) :
  - selon la méthode ORTHOMIN
  - selon la méthode des gradients bi-conjugués.

En l'absence de diffusion, la méthode itérative converge très rapidement mais dans le cas général les méthodes par gradients conjugués sont plus performantes.

## 2.4. - Couplage

La densité du fluide est calculée à partir de l'équation du transport qui fait intervenir les débits d'échange, qui font eux-mêmes intervenir la densité. Les deux calculs : calcul hydrodynamique et calcul de transport doivent donc être couplés. Dans ce but, on a utilisé une procédure itérative de Picard :

- a) On part d'un champ initial de densité.
- b) On calcule les pressions (et les charges) donc les débits d'échanges en fonction de ces densités, par l'équation de conservation de l'eau douce, qui utilise la loi de Darcy.
- c) On calcule les concentrations par l'équation de conservation de la masse de soluté (équation du transport).
- d) On calcule le nouveau champ de densités à partir des concentrations.  
On boucle alors sur l'action b).

Le couplage itératif par la méthode de Picard est souvent instable ou oscillant, surtout en régime permanent, puisqu'une faible variation de densité peut entraîner de grandes variations de pression, donc de débits d'échange, qui vont entraîner elles-mêmes

de grandes variations de densité. On introduit donc un coefficient de sous-relaxation qui s'applique aux concentrations (donc indirectement aux densités). En pratique, le coefficient de sous-relaxation de couplage est de l'ordre de 0,2 à 0,3 pour les schémas stables, de 0,01 pour des schémas peu stables (lentille d'eau douce sous l'île de Malte), et même de 0,001 dans le cas de systèmes très instables : biseau salé avec fractures et très forts contrastes de perméabilité.

## 2.5. - Exemples d'application

Quatre exemples d'application variés sont présentés pour illustrer l'intérêt des calculs avec prise en compte de la densité. Les caractéristiques principales de ces exemples sont rassemblées dans le tableau 1.

### 2.5.1. - Exemple 1 - Biseau salé de Henry

C'est un exemple d'écoulement dans un aquifère au contact de la mer avec formation d'un biseau salé dont Henry [1964] donne une solution analytique approchée. Voss et Souza [1987] donnent une revue de nombreux modèles appliqués à cet exemple classique, et montrent que la solution analytique est très approximative puisque la plupart des modèles donnent des résultats cohérents entre eux mais différents de la « solution » de Henry. La figure 4 présente le champ de densité obtenu par le modèle MARTHE avec visualisation des vitesses. Les densités sont cartographiées en accroissement relatif de densité (ou en isochlore). L'eau douce correspond à 0 % et l'eau de la mer à 100 %. On voit nettement le biseau salé avec une zone de transition saumâtre due au coefficient de dispersion. Les résultats sont quasi-identiques à ceux obtenus avec le modèle SUTRA décrits par Voss et Souza [1987].

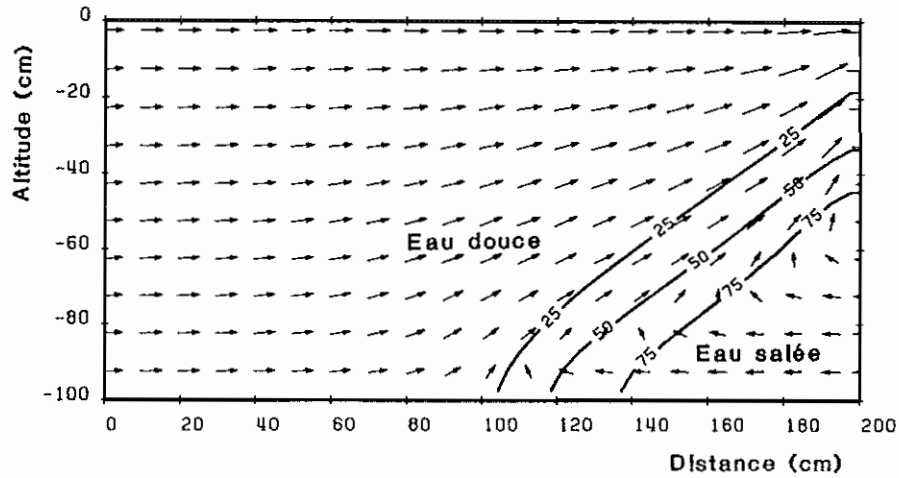


Fig. 4. - Biseau salé de Henry: accroissement relatif de densité ( $\sigma$  = eau douce: 100 % = eau de mer) (Henry salt water wedge)

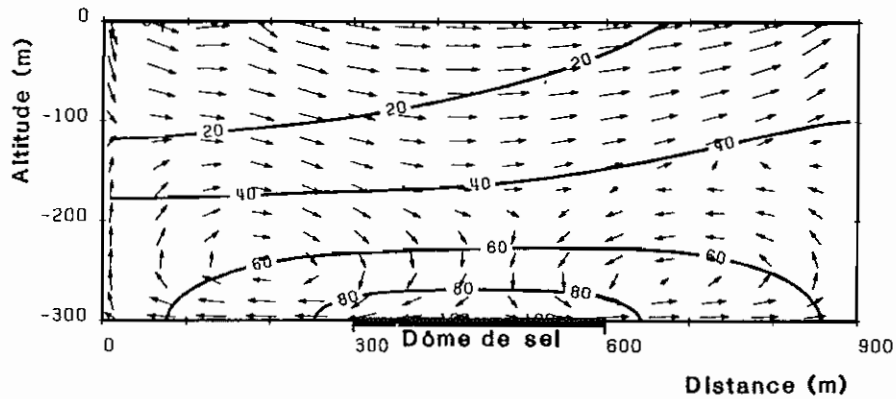


Fig. 5. - Dôme de sel (HYDROCOIN): accroissement relatif de densité en % (salt dome (HYDROCOIN))

### 2.5.2. - Exemple 2 - Dôme de sel (Herbert)

C'est un exemple d'écoulement avec une influence extrêmement forte de la densité qui est décrit par Herbert [1988]. Un dôme de sel situé au centre de la base du système étudié impose une densité relative de 1.200. L'écoulement est provoqué par l'imposition d'un profil de pression sur la limite supérieure, de  $10^5$  pascals (10,29 m d'eau douce) à gauche jusqu'à zéro à droite, avec arrivée d'eau douce. Cet exemple est adapté d'un des tests internationaux HYDROCOIN niveau 1. La figure 5 présente le champ de densité obtenu (0 % = eau pure; 100 % = eau sursalée de densité 1.2). On voit nettement apparaître 2 cellules de convection tournant en sens opposé. L'eau douce, injectée dans le coin supérieur gauche, descend verticalement au milieu du système et s'écoule de part et d'autre au fond, faisant remonter de l'eau plus dense le long des parois latérales.

### 2.5.3. - Exemple 3 - Cellules de convection pures (Elder)

Il s'agit de l'écoulement en régime transitoire produit uniquement par convection naturelle par des différences de densité, dans un système complètement isolé (sans échanges de fluide avec l'extérieur). Une densité très élevée de 1.200 est imposée sur la moitié de la limite supérieure, et une densité de 1.000 (eau douce) est imposée en bas. Elder [1967] donne une solution numérique à ce problème en le considérant comme un problème de convection thermique (the « short-heater problem »). Le fluide à forte densité pénètre par diffusion dans l'eau initialement douce et en équilibre hydrostatique, augmente sa densité et provoque ainsi des courants de convection. La figure 6 montre la densité obtenue par le modèle MARTHE (à droite) après 10 ans ainsi que le champ de vitesses. La partie gauche montre les résultats des calculs de Elder [1967]. Les courbes droite et gauche correspondent à l'isovaleur

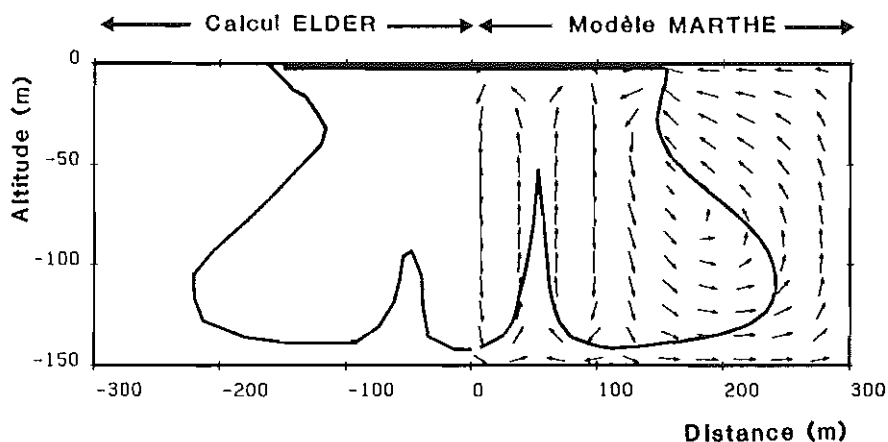


Fig. 6. - Cellules de convection de Elder: accroissement relatif de densité: isovaleur 20 % (Elder convection cells)

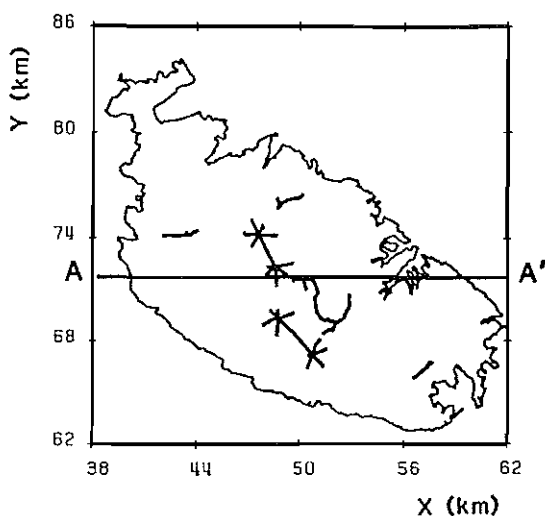


Fig. 7. - Situation de l'aquifère de Malte (location of Malta aquifer)

d'accroissement de densité 20 % (c'est-à-dire une densité de 1.040). Les 2 courbes sont comparables, les différences étant dues aux finesses de discrétisations de l'espace et du temps qui ne sont pas identiques pour les 2 modélisations.

#### 2.5.4. - Exemple 4 - Ile de Malte (Gutierrez)

C'est l'aquifère de l'île de Malte (donc au contact de la mer) modélisée par Gutierrez [1994]. La zone étudiée est modélisée en 3 dimensions avec 15 couches et un total de 36 000 mailles (carrées de 500 m de côté et d'épaisseurs variables). La figure 7 présente l'île avec un système de captages par galeries souterraines (apparaissant comme des étoiles sur la figure) ainsi que la position d'une coupe verticale passant par une zone de captage. La figure 8 est une coupe extraite de la simulation en 3D. Elle

présente le profil de charge (en haut) et les isovaleurs d'accroissement de densité 50 % et 5 % (densités 1.0125 et 1.00125). Elle fait nettement apparaître une remontée de l'eau salée (up-coning).

### 3. - Analyse de sensibilité

Le but de l'analyse de sensibilité est de déterminer un intervalle de confiance sur les paramètres du modèle (perméabilités, coefficients d'emmagasinement, dispersivités, porosités...) mais aussi - et surtout - sur les prévisions émises avec le modèle.

#### 3.1. - Intervalle de confiance sur les paramètres

On suppose que le modèle dépend de  $p$  paramètres  $a$ . Le modèle est calé sur  $n$  observations (de charges, de concentrations...) qui forment un échantillon. Les paramètres  $a_q$  qui sont déterminés par calage sur cet échantillon  $q$  dépendent de cet échantillon. Si on avait calé le modèle sur un autre échantillon, on aurait obtenu des paramètres différents. L'objectif de l'analyse de sensibilité est de déterminer la distribution statistique de l'ensemble des paramètres  $a_q$  qu'on pourrait obtenir selon les échantillons d'observations. C'est la définition de l'intervalle de confiance des paramètres  $a_q$ .

On note :

$e_i$  = écart de simulation par rapport à l'observation  $i = Y_{obs_i} - y_i(a_q)$

$se^2 = \sum_{i=1}^n (e_i)^2$  = somme des carrés des écarts

$n$  = nombre d'observations = nombre d'écarts

$n_e$  = nombre d'écarts indépendants



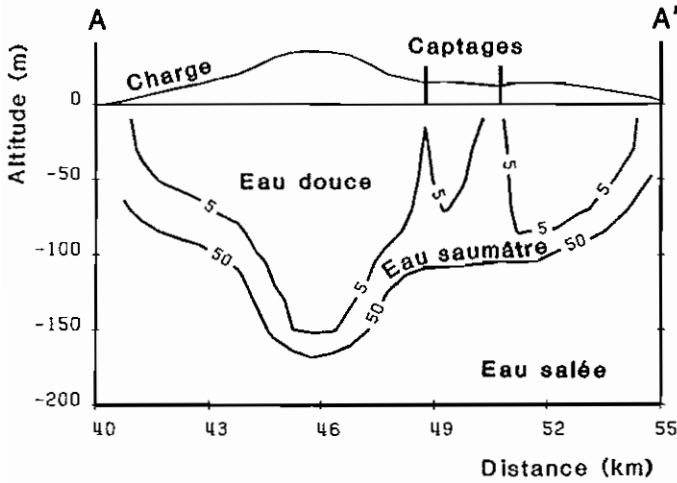


Fig. 8. - Ile de Malte : coupe verticale montrant le profil de densité: isovaleurs d'accroissement de densité 50 % et 5 %. (Malta: vertical density profile)

[VA] = matrice de variance-covariance des paramètres  
 [B] = matrice carrée formée des sommes des produits des dérivées de  $y_i$  par rapport aux paramètres  $a_k$  et  $a_j$ . Le terme générique de [B] est  $[b_{kj}]$  :

$$b_{kj} = \sum_i \left( \frac{\partial y_i}{\partial a_k} \cdot \frac{\partial y_i}{\partial a_j} \right)$$

Thiéry [1993e] montre que la matrice de variance-covariance peut être calculée par :

$$[VA] = (n / n_e) \cdot se^2 \cdot [B]^{-1}$$

Le nombre d'écarts indépendants  $n_e$  équivalent au nombre d'écarts autocorrélés  $n$  peut être estimé à partir du variogramme  $g$  des écarts. On considérera par exemple que toutes les observations comprises dans un disque de rayon  $d$ , centré sur une observation, tel que le coefficient de corrélation soit supérieur ou égal à 0,5 représentent une seule observation indépendante. Le rayon  $d$  est donc défini par :

$$0,5 = 1 - g(d) / se^2$$

Dans un domaine de  $n$  mailles carrées de côté  $a$ , donc de superficie  $n \cdot a^2$ , on a  $n_e$  disques de rayon  $d$  avec :

$$n_e = n \cdot a^2 / (\pi \cdot d^2)$$

### 3.2. - Intervalle de confiance sur les prévisions émises avec le modèle

On suppose que les prévisions  $y_c$  peuvent être considérées comme dépendant (au moins localement) linéairement de paramètres  $a_j$ . La variance  $sy_c^2$  de la prévision  $y_c$  est alors donnée par :

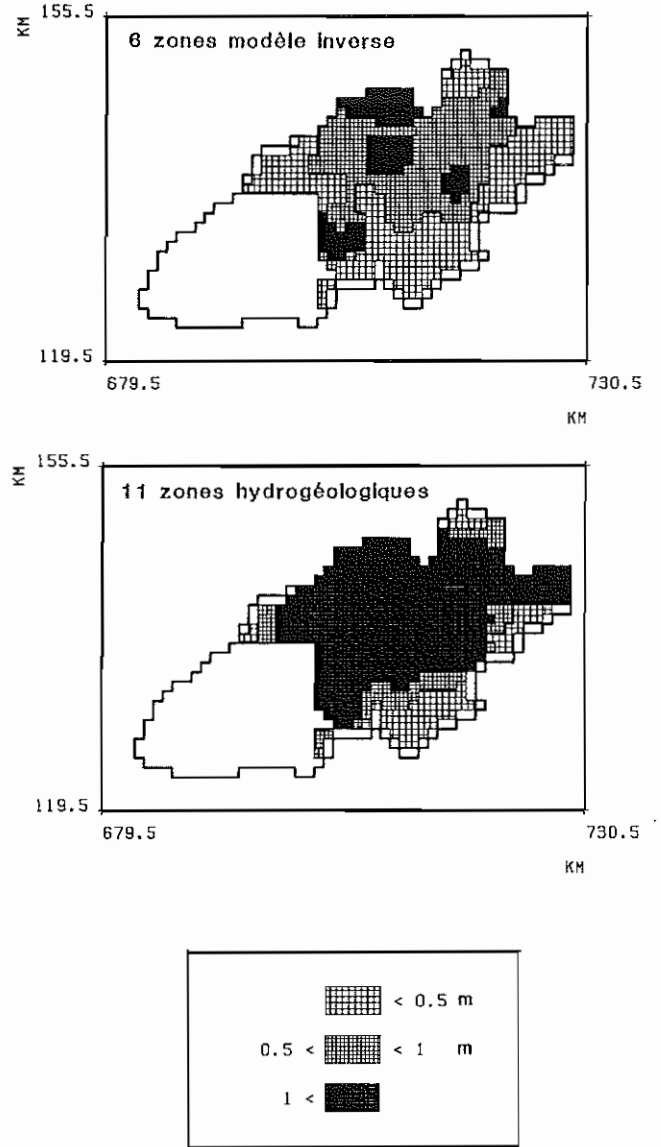


Fig. 9. - Nappe de l'étang de Thau. Ecarts-types de simulation des charges (en m) (the Thau aquifer. Standard deviations of head simulation)

$$sy_c^2 = \sum_j \sum_k r_{jk} \cdot sa_j \cdot sa_k \cdot (dy_c / da_j) \cdot (dy_c / da_k)$$

avec :

$sa_j$  = écart-type du paramètre  $a_j$

$r_{jk}$  = coefficient de corrélation entre les paramètres  $a_j$  et  $a_k$

La variance  $sy_c^2$  est uniquement due à l'incertitude sur les paramètres du modèle. La variance  $sy_p^2$  de l'erreur entre une prévision  $y_c$  et une valeur observée  $y_{obs}$  doit prendre en compte également la variance de l'erreur de calage  $sc^2$  qui peut être due à une erreur sur  $y_{obs}$  :

$$sy_p^2 = sy_c^2 + sc^2$$

### 3.3. - Application à l'aquifère de l'étang de Thau

L'aquifère de l'étang de Thau est situé au sud-ouest de Montpellier (Hérault). Il est bordé au sud-est par les étangs de Thau, d'Ingril, de Vic, d'Arnel, tous au niveau de la mer (cote zéro). Le modèle, en régime permanent, est constitué d'une couche de 701 mailles carrées de 1 km de côté. Lors de la modélisation de cet aquifère en 1988 un calage manuel (par essais erreurs) a été obtenu avec 11 zones « hydrogéologiques » de perméabilité homogènes [Auriol *et al.*, 1988]. En 1993, une modélisation inverse décrite par Thiéry [1993e, 1993f ce numéro] a permis de déterminer 6 zones homogènes. Un calage automatique dans ces 6 zones [Thiéry, 1993d, 1993f] a permis de déterminer les perméabilités optimales de ces zones. Le calage automatique permet de reproduire plus finement la carte piézométrique observée, mais il doit être contrôlé par un hydrogéologue. Une analyse de sensibilité sur ces 2 calages, décrite par Thiéry [1993e] a montré que le calage sur les 6 zones du modèle inverse est nettement plus stable (donc plus fiable). L'écart-type relatif moyen associé aux perméabilités des 6 zones est égal à 20 %, alors que celui associé aux perméabilités des 11 zones est égal à 51 %. La figure 9 présente la carte des écarts-types des charges calculées dans la situation du calage.

L'écart-type moyen est de 0,61 mètre avec les 6 zones optimales contre 1,54 m avec les 11 zones « hydrogéologiques ». La figure montre que l'extension de la zone avec un écart-type supérieur à 1 m est très réduite dans le premier cas.

## 4. - Conclusion

Les problèmes à résoudre dans le domaine de l'environnement et du stockage des déchets ont rendu nécessaire la modélisation de systèmes aquifères de plus en plus complexes et de nombreux phénomènes couplés entre eux. Les modèles classiques d'écoulement en milieux poreux ont du être étendus pour permettre la simulation des écoulements à travers la zone non saturée et la prise en compte des variations de densité du fluide.

Les méthodes présentées et illustrées par des exemples montrent une partie du domaine d'application du modèle MARTHE du BRGM. Actuellement, certaines composantes sont couplées entre elles : zone saturée et zone non saturée, densité et charges, écoulement et transport, etc. La modélisation des schémas très complexes rend nécessaire un couplage encore plus total, en particulier : des interactions entre les phénomènes thermiques, chimiques

et les écoulements, par l'intermédiaire des variations de densité, de viscosité et de perméabilité.

### Remerciements

Cet article est la publication scientifique n° 93 077 du BRGM ; il a été réalisé dans le cadre d'un projet financé sur crédits de recherches du BRGM.

## Références bibliographiques

- AURIOL J., CARLIER Ph., MARCHAL J.P. (1988). - Modélisation de l'aquifère karstique de l'étang de Thau. - Rapport BRGM interne 88 SGN 459 LRO.
- BONNET M., MOUSSIÉ B., SAUTY J.P. (1974). - L'exploitation des eaux souterraines en domaine littoral. Exemple des cotes du Bassin aquitain. Présentation du modèle INTRANS. - Rapport BRGM 74 SGN 368 AME.
- CÉLIA M.A., BOULOUTAS E.T., ZARBA R.L. (1990). - A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. - *Water Resources Research*, vol. 26, 7, pp. 1483-1496.
- COOLEY R.L. (1983). - Some new procedures for numerical solution of variability saturated flow problems. - *Water Resources Research*, vol. 19, 5, pp. 1271-1285.
- ELDER J.W. (1967). - Transient convection in a porous medium. - *J. Fluid Mech.*, 27 (3), pp. 609-623.
- GUTIERREZ A. (1994). - Evaluation des ressources en eaux souterraines de l'île de Malte - Hydroclimatologie, hydrogéologie, qualité des eaux et modélisation. - Thèse présentée à l'Université Paris VI (à paraître).
- HENRY H.R. (1964). - Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers. U.S. Geol. Surv. Water Supply Pap., 1613-C, pp. C71-C84.
- HERBERT A.W., JACKSON C.P., LEVER D.A. (1988). - Coupled groundwater flow and solute transport with fluid density strongly dependent upon concentration. - *Water Resources Research*, vol. 24, 2, pp. 1781-1795.
- HILL M.C. (1990a). - Preconditioned Conjugate Gradient 2 PCG2. A computer program for solving groundwater flow equations. - USGS, Denver (CO).
- HILL M.C. (1990b). - Solving groundwater flow problems by conjugate-gradient methods and the strongly implicit procedure. - *Water Resources Research*, vol. 26, 9, pp. 1961-1969.
- KIRKLAND M.R., HILLS R.G., WIERENGA P.J. (1992). - Algorithms for solving Richard's equation for variably saturated soils. - *Water Resources Research*, vol. 28, 8, pp. 2049-2058.
- ROSS P.J. (1990). - Efficient numerical methods for infiltration using Richard's equation. - *Water Resources Research*, vol. 26, 2, pp. 279-290.
- THIÉRY D. (1988). - Calculation of natural aquifer recharge from rainfall with an unsaturated zone model solving Richard's equation. - Internat. Symp. AIRH on Interaction between groundwater and surface water. Ystad (Sweden). E. Bloomdahl ed., pp. 45-57.
- THIÉRY D. (1990a). - MERINOS : Modélisation de l'évapotranspiration, du ruissellement et de l'infiltration dans la zone non saturée. - Rapport BRGM R 30623 EAU 4S 90.
- THIÉRY D. (1990b). - Logiciel MARTHE - Modélisation d'Aquifère par un maillage Rectangulaire en régime Transitoire pour le calcul Hydrodynamique des Ecoulements. Version 4.3. - Rapport BRGM R 32210.

- THIÉRY D. (1993). - Modélisation multicouche et à 3 dimensions des écoulements d'eau et des transferts à travers la zone non saturée. - GEOCONFINE : Symp. Internat. Géologie et Confinement des déchets toxiques, Montpellier, juin 1993. GEOCONFINE 93, Arnould, Barrès et Côme (ed.), 1993 Balkema, Rotterdam, pp. 467-472.
- THIÉRY D. (1993*b*). - Résolution matricielle et nouvelles géométries dans le logiciel MARTHE. - Rapport BRGM 4S/EAU n° R37762.
- THIÉRY D. (1993*c*). - Automatic calibration of groundwater models by the head gradient method. GQM 93. - Internat. Conf. on Groundwater quality management. Tallinn, Estonie, september 1993.
- THIÉRY D. (1993*d*). - Calibration of groundwater models by optimisation of parameters in Homogeneous Geological Zones. - Internat. Conf. on « Stochastic and statistical Methods in Hydrology and Environmental Engineering », Univ. of Waterloo, Ontario.
- THIÉRY D. (1993*e*). - Evaluating Predictive Reliability of Groundwater Models by Sensitivity Analysis : GQM 93. - Internat. Conf. on Groundwater Quality Management. Tallinn, Estonie, september 1993 - Poster volume, pp. 115-126.
- THIÉRY D. (1993*f*). - Calage automatique des modèles hydrodynamiques maillés. Détermination de zones géographiques homogènes et des paramètres optimaux associés - Application à 5 systèmes aquifères. - *Revue Hydrogéologie*, 1993, n° 4 (cette revue).
- VAUCLIN M., HAVERKAMP R., VACHAUD G. (1979). - Résolution numérique d'une équation de diffusion non linéaire. - Presse Univ. Grenoble, 183 p.
- VOSS C.I., SOUZA W.R. (1987). - Variable Density Flow and Solute Transport Simulation of regional Aquifers Containing a narrow Freshwater-Saltwater Transition Zone. - *Water Resources Research*, vol. 23, 10, pp. 1851-1866.