

MINISTÈRE DE L'ENVIRONNEMENT
ET DE LA LUTTE CONTRE
LES CHANGEMENTS CLIMATIQUES

Guide de présentation des travaux de modélisation hydrogéologique

Renseignements

Pour tout renseignement, vous pouvez communiquer avec le Centre d'information.

Téléphone : 418 521-3830
1 800 561-1616 (sans frais)

Télécopieur : 418 646-5974

Formulaire : www.environnement.gouv.qc.ca/formulaires/renseignements.asp

Internet : www.environnement.gouv.qc.ca

Pour obtenir un exemplaire du document :

Ministère de l'Environnement et de la Lutte contre
les changements climatiques
675, boul. René-Lévesque Est
Québec (Québec) G1R 5V7

Ou

Visitez notre site Web : www.environnement.gouv.qc.ca

Référence à citer

Ministère de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques. *Guide de présentation des travaux de modélisation hydrogéologique*, 2020, 48 p., [En ligne],
<http://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/souterraines/Guide-modelisation-hydrogeologique.pdf>

Dépôt légal – 2020
Bibliothèque et Archives nationales du Québec
ISBN 978-2-550-87203-0 (PDF)

Tous droits réservés pour tous les pays.

© Gouvernement du Québec – 2020

TABLE DES MATIÈRES

1.	Introduction et contexte du guide	1
2.	Objectifs de modélisation	2
3.	Le modèle conceptuel	3
4.	Complexité vs simplicité	7
5.	Modèle mathématique et approche choisie	8
6.	Définition et présentation du modèle du site	9
	6.1 Domaine	9
	6.2 Dimensionnalité	9
	6.3 Discrétisation	10
7.	Conditions limites et conditions initiales	12
8.	Hydrostratigraphie et paramètres physiques et chimiques	14
9.	Calibration et résultats	16
10.	Analyse de sensibilité et de l'incertitude	23
11.	Discussion	24
12.	Conclusions et recommandations	26
13.	Archivage	26
14.	Erreurs et faiblesses typiques à éviter	26
15.	Synthèse	27
16.	Références bibliographiques	28

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1. Types de données utilisées pour le développement d'un modèle conceptuel _____ 6

Tableau 2. Exemple d'un tableau sommaire qui définit les paramètres importants dans un modèle 3D de l'écoulement et du transport réactif _____ 15

LISTE DES FIGURES

Figure 1 : Exemples de modèles conceptuels, vues en coupe	4
Figure 2 : Exemples de maillages et des conditions limites	11
Figure 3 : Image graphique d'une simulation numérique d'écoulement 2D dans un système hétérogène	13
Figure 4 : Exemples des méthodes de présentation d'une calibration	17
Figure 5 : Exemples de graphiques de calibration	18
Figure 6 : Exemple d'une aire de captage en régime permanent	19
Figure 7 : Exemple d'un système d'écoulement simulé en 3D	20
Figure 8 : Exemples des méthodes de présentation des résultats d'un modèle numérique	21
Figure 9 : Exemples des présentations de simulations de transport advectif-dispersif en 3D	22
Figure 10 : Exemples des analyses d'incertitude et de sensibilité	25

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE 1	Structure suggérée pour un rapport de modélisation hydrogéologique
ANNEXE 2	Liste de vérification du contenu d'un rapport de modélisation hydrogéologique
ANNEXE 3	Conditions limites : révision et erreurs
ANNEXE 4	Critères de précision
ANNEXE 5	Description sommaire des modèles numériques
ANNEXE 6	Définitions des symboles

REMERCIEMENTS

La publication de ce guide a été rendue possible grâce au travail de rédaction effectué par le professeur John Molson, du département de géologie et de génie géologique de l'Université Laval. La Direction de l'eau potable et des eaux souterraines tient à souligner l'importance de son apport.

1. INTRODUCTION ET CONTEXTE DU GUIDE

Ce guide a été rédigé à l'intention des consultants qui réalisent des travaux de modélisation hydrogéologique. Il décrit les « bonnes pratiques » à appliquer lors de la rédaction d'un rapport destiné à présenter ce type de travaux et leurs résultats. Ainsi, le lecteur d'un tel rapport sera en mesure de connaître les données que le modélisateur avait à sa disposition, la démarche qu'il a suivie pour réaliser son travail de modélisation et les résultats qu'il a obtenus. Les recommandations de ce guide s'appliquent pour les modèles autant analytiques que numériques et pour l'écoulement de l'eau souterraine et le transport de masse ou de chaleur.

Il est supposé que l'utilisateur de ce guide possède déjà la connaissance nécessaire en hydrogéologie et en modélisation. Pour cela, ce guide ne donne pas une révision de la méthodologie de modélisation. La règle de l'art en modélisation numérique est déjà définie dans plusieurs références notamment : Anderson et collab. (2015), Zheng et Bennett (2002), Barnett et collab. (2012), Neuman et Wierenga (2003), ASTM (2008; 2013; 2016), Refsgaard et Henriksen (2004), Reilly et Harbaugh (2004) et US EPA (1994).

Après la lecture de ce guide, le modélisateur devrait être en mesure de mieux présenter les travaux de modélisation hydrogéologique, incluant la description de données disponibles, la construction du modèle conceptuel, la présentation du modèle numérique du site, la calibration du modèle, l'analyse de sensibilité et de l'incertitude du modèle, la présentation des simulations prédictives et une analyse des retombées.

Un modèle de table des matières pour un rapport de modélisation hydrogéologique est suggéré à l'annexe 1 de ce guide. L'annexe 2 comporte une liste de vérifications à faire pour s'assurer que tous les éléments nécessaires à l'analyse du rapport sont déjà fournis. Un sommaire des conditions limites est donné à l'annexe 3 et les critères de précision à l'annexe 4. Finalement, l'annexe 5 comporte une description sommaire des modèles typiquement utilisés dans ce contexte et un glossaire est fourni à l'annexe 6.

2. OBJECTIFS DE MODÉLISATION

Le modèle conceptuel, le modèle numérique du site, les types de simulations ainsi que les choix des méthodes de présentation des résultats du modèle dépendent, entre autres, des objectifs de la modélisation. Bien que ces objectifs spécifiques puissent évoluer dans le temps, des objectifs principaux devraient être bien définis au début du projet, bien avant le développement du modèle. Ces objectifs de modélisation vont jouer un rôle sur l'approche de caractérisation du site, incluant le type de données collectées, leur distribution en espace, la fréquence de mesures, etc.

Dans tous les cas, l'objectif général d'une étude de modélisation est de comprendre le comportement d'un système hydrogéologique pour aider les parties prenantes à prendre des décisions. Par exemple, un modèle d'écoulement avec un traçage de particules peut servir à définir les aires de protection d'un puits de prélèvement d'eau souterraine, ou un modèle de transport de masse peut être utilisé pour choisir un système de restauration optimal d'un site contaminé. Dans cette perspective, la présentation des résultats joue un rôle critique pour transmettre ces connaissances, pour démontrer à l'utilisateur (ou au public) que le modèle est fiable, et pour bien encadrer les résultats dans le contexte des incertitudes et des limitations applicables.

En effet, le choix du modèle, l'étendue du domaine (incluant la dimensionnalité et la localisation des limites), les choix des processus et paramètres et les scénarios simulés dépendent des objectifs. Si l'objectif est de déterminer l'aire d'alimentation d'un puits par exemple, un modèle 2D vertical en coupe ne sera pas justifiable compte tenu des gradients hydrauliques 3D qui sont générés par un tel puits. Si le transport des contaminants est un objectif, le maillage doit être typiquement raffiné plus que celui qui est généré pour le système d'écoulement seulement.

Plusieurs objectifs généraux de modélisation peuvent être établis, notamment :

1. Mieux comprendre le comportement du système hydrogéologique;
2. Valider le modèle conceptuel d'un site;
3. Aider à planifier les travaux de caractérisation sur le terrain basé sur les prédictions et l'importance ou la sensibilité des paramètres;
4. Évaluer l'impact d'un projet sur les autres utilisateurs des ressources en eaux souterraines et sur l'environnement;
5. Définir des règles ou des conditions d'exploitation sécuritaire des ressources en eaux souterraines;
6. Prédire l'impact potentiel des changements climatiques sur les ressources en eaux souterraines.

En plus des objectifs généraux, des objectifs plus spécifiques peuvent être déterminés, notamment :

1. Décrire les systèmes d'écoulements locaux et régionaux, incluant les vitesses, les lignes d'écoulement et les zones de recharge et de résurgence, dans le cadre du développement durable d'une ressource en eaux souterraines;
2. Déterminer le rabattement ou délimiter les aires d'alimentation d'un puits;
3. Évaluer ou comparer l'efficacité d'une méthode de restauration d'un aquifère contaminé;
4. Prédire l'impact environnemental des contaminants dissous provenant d'un déversement (ponctuel ou continu) sur la qualité des eaux souterraines;
5. Réaliser la conception d'un système de confinement hydraulique d'un terrain contaminé.

Par conséquent, les résultats d'une modélisation seront évalués par rapport aux objectifs. Cette étape sera utile également pour le modélisateur avant et pendant le projet en lui donnant une cible afin d'optimiser l'approche choisie et les formats de présentation.

Le cadre réglementaire et les besoins et attentes des parties prenantes qui ont motivé l'étude vont jouer un rôle important sur les objectifs et devraient donc être également définis et pris en compte dès le début du projet de modélisation.

3. LE MODÈLE CONCEPTUEL

Mise en contexte

Un modèle numérique ou analytique est basé sur un modèle conceptuel du contexte hydrogéologique du site qui est défini selon les connaissances actuelles (ou supposées), incluant les données disponibles, les processus physicochimiques pertinents et des hypothèses. Tout comme un modèle numérique d'un site, le modèle conceptuel représente une simplification du système réel. Néanmoins, le rapport de modélisation devrait être établi autour de ce modèle conceptuel, en utilisant ses caractéristiques observées pour justifier les choix reliés au modèle, comme les limites, la structure hydrogéologique et les processus inclus.

En fait, Zheng et Bennet (2002) suggèrent que le développement d'un modèle conceptuel fiable est l'une des étapes les plus importantes d'une étude de modélisation et représente l'équivalent d'une caractérisation d'un site. Ils notent en particulier que le développement du modèle conceptuel et du modèle numérique devrait être un processus itératif. Oreskes et Belitz (2001) soulignent aussi l'importance de développer un modèle conceptuel fiable, mais aussi de décrire les problèmes et de reconnaître les incertitudes qui y sont associées.

Le modèle conceptuel donne un portrait d'ensemble des connaissances d'un site incluant :

- la géométrie (l'étendue horizontale ou verticale selon la dimensionnalité du modèle);
- le type du milieu (poreux/fracturé/saturé/non saturé);
- la géologie et l'hydrostratigraphie;
- les frontières naturelles, les zones de recharge et de résurgence, les eaux de surface et leur lien avec les eaux souterraines;
- les directions d'écoulement des eaux souterraines, c'est-à-dire tracées avec des flèches basées sur les gradients hydrauliques (∇h) horizontaux et verticaux;
- les processus physicochimiques (écoulement, advection, dispersion, conduction, sorption, décroissance/biodégradation, réactions chimiques, échange de phase dont volatilisation et dissolution, etc.) et les paramètres physiques pertinents (h , q , K , k , θ , S_s , λ , T , r , α_L , K_d , etc.);
- les sources des contaminants (existantes ou potentielles) et leur distribution dans l'espace et les variations de concentrations dans le temps;
- l'état supposé du système est aussi important à décrire, soit en régime permanent ou transitoire.

La méthode la plus efficace de présenter un modèle conceptuel est une description détaillée avec des graphiques conceptuels, dont une ou des coupes verticales (pour les systèmes 2D ou 3D) qui suivent une ligne d'écoulement du système 3D (ex. : fig. 1). En effet, afin de justifier une approche simplificatrice de modélisation (ex. : 2D horizontale ou verticale), il faut présenter une coupe verticale conceptuelle et montrer que le système d'écoulement (et du transport) réel est cohérent avec le modèle conceptuel simplifié. En 3D, plusieurs coupes verticales le long des directions d'écoulement différentes indiquées

dans la vue en plan, qui montrent les directions d'écoulement supposées dans la coupe, seraient utiles pour préciser la structure du système hydrogéologique et le contexte du modèle numérique.

La coupe verticale (et la vue en plan dans le cas 3D) devrait inclure :

- La structure géologique : hydrostratigraphie, dépôts meubles, roc, etc.
- Les conditions de surface : zones de recharge et de résurgence
- La forme de la nappe et les équipotentielles, tracées à partir des niveaux piézométriques observés
- Les flèches qui montrent les directions d'écoulement supposées
- Les puits de pompage et les puits d'observation
- La zone source des contaminants
- Le réseau hydrographique de surface (vue en plan; cours d'eau, lacs, etc.)
- Autres détails pertinents

Dans le cas 3D, plusieurs vues en plan devraient être incluses au besoin, par exemple pour chaque aquifère.

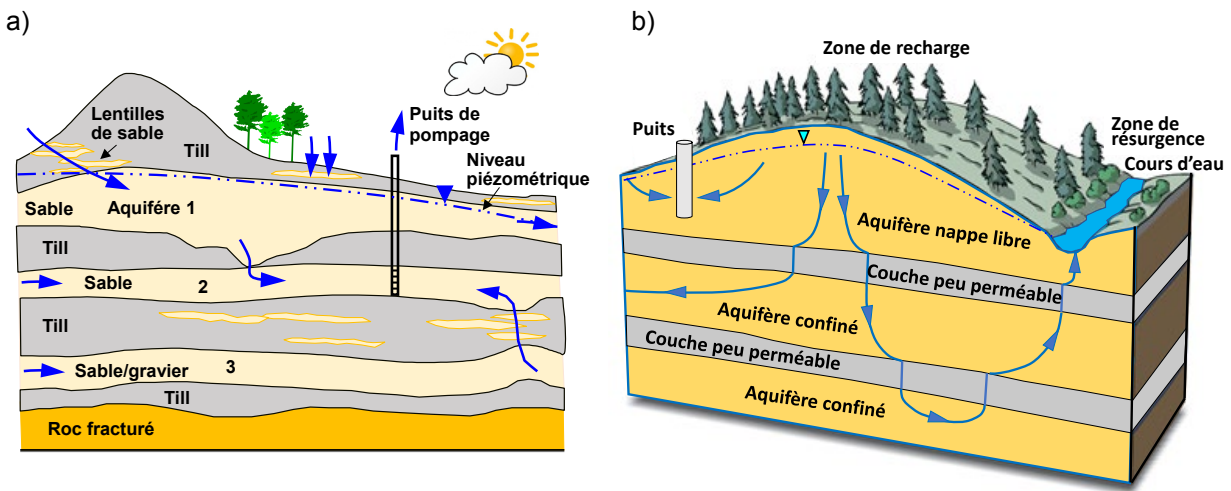


Figure 1 : Exemples de modèles conceptuels, vues en coupe : a) Moraine multi-aquifère avec l'hydrostratigraphie et les directions d'écoulement (d'après Frind et collab., 2014), b) Système multi-aquifère montrant les zones de recharge et les zones de résurgence (d'après CCA, 2009; USGS, 2008).

Hypothèses

La construction d'un modèle conceptuel est basée sur des hypothèses, suppositions, limitations et simplifications. Le rapport de modélisation doit décrire ces aspects et doit fournir des arguments raisonnables pour les justifier. Dans ce contexte, la section du rapport de la modélisation qui traite du modèle conceptuel pour l'écoulement doit fournir une discussion détaillée des aspects suivants :

1. Le contexte du site (localisation, géologie, hydrogéologie);
2. La dimensionnalité du système (1D, 2D plan, 2D coupe, 3D de symétrie radiale ou 3D?);
3. L'état de saturation (saturé / non saturé?);
4. Le régime (permanent ou transitoire?);
5. Les conditions limites et les taux de pompage (s'il y a lieu);
6. Homogène/hétérogène, isotrope /anisotrope?
7. Milieu poreux équivalent ou fractures discrètes? (c'est-à-dire en milieu fissuré, comment les fractures ont-elles été incluses?) Et comment justifier la conductivité hydraulique équivalente en milieu fissuré;
8. Géométrie simplifiée (ex. : épaisseur des couches, hydrostratigraphie, interfaces);
9. Effets d'écoulement non linéaires inclus ou négligés (ex. : effet de température, masse volumique, viscosité du fluide sur les vitesses);
10. Données : valeurs, étendue spatiale/temporelle, sources de données, leurs incertitudes et leur fiabilité.

En plus des hypothèses ci-dessus, les caractéristiques suivantes sont critiques à définir pour un modèle conceptuel d'un système de transport :

1. Quelle est la forme de la zone source? C'est-à-dire la condition limite, les conditions initiales, la phase dissoute, la phase immiscible (non aqueuse) ou gazeuse, la source ponctuelle ou diffuse?
2. Décrire les conditions sur toutes les limites du modèle de transport : concentration ou flux de masse imposé? Dans tous les cas (écoulement et transport), il faut indiquer si et comment les conditions limites varient dans l'espace et dans le temps.
3. Quels sont les processus et les paramètres de transport inclus dans le modèle (ex. : advection, advection-dispersion, dissolution d'une phase non aqueuse à l'équilibre ou cinétique, taux de réaction linéaire ou non linéaire, biodégradation, sorption, réactions (bio-)chimiques, volatilisation)?
4. Le type de couplage entre l'écoulement et le transport.

Deux exemples de modèles conceptuels sont donnés à la figure 1.

Données

Un modèle conceptuel est basé sur plusieurs types de données. Alley et ses collaborateurs (1999) mentionnent trois groupes de données, soit physiques, hydrologiques et chimiques. Le tableau 1 montre les données les plus importantes qui doivent être présentées dans le rapport de modélisation.

Tableau 1. Types de données utilisées pour le développement d'un modèle conceptuel, et qui devraient être incluses dans un rapport de modélisation (dépendant du contexte). D'après Alley et collab. (1999).

Cadre physique

- Cartes topographiques, occupation du sol
- Cartes géologiques : dépôts quaternaires et roc
- Cartes hydrogéologiques : étendue et limites des aquifères et aquitards
- Cartes des élévations des interfaces hydrostratigraphiques
- Cartes des épaisseurs saturées des aquifères
- Cartes des conductivités hydrauliques et des coefficients d'emmagasinement
- Note : les cartes doivent être tracées sur une échelle appropriée et donner une bonne visibilité

Cadre hydrologique

- Données de précipitations, évaporation, consommation diffuse et la recharge nette
- Données des stations de jaugeage
- Cartes des réseaux hydrologiques
- Taux de résurgence des eaux souterraines vers l'eau de surface
- Localisation et taux de pompage des puits et leur historique
- Hydrographes de puits et cartes des charges hydrauliques incluant les surfaces piézométriques
- Données des flux d'eau souterraine

Cadre chimique

- Caractéristiques des solides (minéraux) et des eaux souterraines naturelles
- Variation spatiale de la qualité des eaux souterraines (vue en plan, vue en coupe), ions majeurs, mineurs, paramètres clés (pH, température, solides dissous totaux, demande chimique d'oxygène alcalinité, potentiel d'oxydoréduction, etc.)
- Changements transitoires de la qualité des eaux
- Zones sources et types de contaminants et leur phase
- Caractérisation chimique des eaux contaminées
- Qualité des eaux de surface

4. COMPLEXITÉ VS SIMPLICITÉ

La complexité d'un modèle dépend entre autres des objectifs, des risques et, évidemment, de la complexité du site et des données disponibles. Un constat général est qu'il faut inclure assez de complexité pour bien représenter le modèle conceptuel, pas moins et, souvent, pas plus. Trop de complexité peut avoir des conséquences négatives, tout comme un manque de complexité. Par exemple, un modèle complexe pourrait être plus difficile à comprendre, plus difficile à calibrer et, avec plus de paramètres incertains, les prédictions pourraient être moins fiables. Un modèle complexe peut aussi sembler plus précis et plus fiable, ce qui n'est pas toujours le cas.

D'autres constats s'appliquent également :

- Les suppositions/hypothèses doivent être cohérentes (entre elles et avec le modèle conceptuel).
- Des éléments de complexité ne devraient pas être ajoutés dans un modèle conceptuel si les données disponibles ne le justifient pas.
- Le degré de simplicité (ou de complexité) doit être justifié.

Plusieurs auteurs ont relevé les avantages et les inconvénients de la simplicité vs la complexité des modèles. Hill (2006), par exemple, note que les modèles complexes, avec plus de paramètres, peuvent produire une meilleure calibration entre les données simulées et les données observées, mais, si cette meilleure calibration était due à une meilleure corrélation avec les erreurs d'observation, leurs prédictions seront en général moins précises. Hill suggère donc qu'il existe un équilibre à respecter entre le nombre de paramètres à inclure dans un modèle (la haute complexité) et la fiabilité des prédictions. Elle note en particulier que des problèmes peuvent survenir quand les données ne sont pas suffisantes pour caractériser les processus ou paramètres qui sont importants pour les prédictions. Elle recommande de commencer avec un modèle conceptuel aussi simple que possible, et d'ajouter de la complexité seulement quand les données le supportent et quand c'est important pour les prédictions. L'addition de complexité qui ne peut pas être validée par des données produira un modèle qui n'est pas fiable (Nordstrom, 2012; Oreskes, 1998).

Dans le contexte du transport de masse, Konikow (2011) recommande aussi de partir d'un modèle conceptuel simple, puis de complexifier progressivement le modèle jusqu'à l'atteinte d'une meilleure compréhension du système. Il note que, lorsqu'un modèle devient très complexe, les interrelations dans le modèle et l'effet de chaque paramètre sur les résultats deviennent plus difficiles à comprendre. Un modèle est par définition une simplification de la réalité et il serait impossible d'aspirer à un modèle qui représente parfaitement la réalité. Konikow (2011) suggère aussi que les erreurs dans le modèle conceptuel d'un système d'écoulement et du transport de masse pourraient être la source principale des erreurs de prédiction. Il recommande d'utiliser un modèle simple afin de tester et d'améliorer la compréhension conceptuelle du système.

Voss (2011a et b) présente d'autres arguments qui justifient la simplicité vs la complexité. Dans ce contexte, il cite Saint-Exupéry qui a écrit : « Il semble que la perfection soit atteinte non quand il n'y a plus rien à ajouter, mais quand il n'y a plus rien à retrancher » (*Terre des Hommes*, 1939).

Dans un rapport de modélisation, il faut trouver un équilibre entre la complexité et la simplicité, justifier l'approche choisie et reconnaître les limitations. L'effet d'une approche simplifiée d'un modèle conceptuel peut être compensé, dans certains cas, par une analyse de sensibilité des paramètres, en utilisant un scénario pessimiste.

5. MODÈLE MATHÉMATIQUE ET APPROCHE CHOISIE

Deux types de modèles existent pour résoudre les équations aux dérivés partielles qui définissent les processus hydrogéologiques : modèles analytiques (ou semi-analytiques) et modèles numériques. Ces deux types de modèles s'appliquent, avec des hypothèses et des limitations, pour l'écoulement de l'eau souterraine et le transport de masse ou de l'énergie.

Le *Guide technique pour la détermination des aires de protection* du MELCC¹, par exemple (voir la figure 12), permet (en plus des rayons fixes) l'application de ces deux types de modèles et explique comment choisir l'approche de modélisation (c'est-à-dire la solution analytique ou solution numérique; voir aussi Rasmussen et collab., 2006). Dans plusieurs cas, ces deux options sont permises selon les directives, donc il faut choisir l'approche la plus raisonnable et justifier l'approche choisie. En plus, il existe une gamme de modèles analytiques et numériques qui pourraient être utilisés selon le contexte (objectifs, complexité du système, enjeux, données disponibles, etc.). L'utilisateur devrait connaître les avantages et les inconvénients ainsi que les besoins de données de chaque approche (voir, par exemple, Anderson et collab., 2015; Zheng et Bennett, 2002).

Dans le rapport de modélisation, il faut préciser l'approche choisie et justifier ce choix selon le cadre réglementaire, le modèle conceptuel du site et les données disponibles. Les avantages et les inconvénients devraient faire partie de la justification.

Pour plusieurs modèles, typiquement les modèles numériques, plusieurs options doivent être définies, par exemple des options pour les solveurs de matrices, ainsi que les paramètres d'optimisation et les critères de convergence et de pondération. Ces paramètres peuvent jouer un rôle sur la précision, l'exactitude et la fiabilité des simulations et devraient être également mentionnés dans le rapport

Pour les modèles analytiques ou numériques, il faut donc indiquer :

1. Le nom, le type et la version du modèle, avec la référence (ex. : le guide d'utilisateur, le lien Web). Des références récentes où le modèle a été déjà appliqué pour des objectifs semblables, et à la même échelle, sont également recommandées.
2. Les processus physiques et les équations gouvernantes de base qui sont inclus dans le modèle du site (ex. : écoulement saturé en régime permanent, approche Dupuit-Forchheimer, transport advectif ou advectif-dispersif, sorption, dégradation linéaire ou non linéaire, réactions géochimiques, etc.). Seulement les équations (processus) et les réactions incluses dans le modèle conceptuel pour le site à l'étude (c'est-à-dire celles qui sont pertinentes pour le site) devraient être incluses dans le rapport, et pas toutes les équations et les réactions possibles que le modèle analytique ou numérique peut résoudre.
3. L'approche analytique (ex. : la solution Ogata-Banks, Dupuit, etc.) ou numérique (ex. : différences finies, éléments finis, éléments frontières ou volume de contrôle).
4. La méthodologie choisie, s'il y en a plusieurs (ex. : traçage de particules sans ou avec dispersion, marche au hasard [*random walk*] ou transport inverse pour décrire les aires de captage), et les paramètres numériques (ex. : critères de convergence, type de couplage écoulement-transport, solveur matriciel, pondération, etc.).
5. Les limitations et les hypothèses inhérentes au modèle analytique ou numérique (indépendant des suppositions du modèle conceptuel choisi). Par exemple, la dispersion est normalement

¹ Ministère de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques. *Détermination des aires de protection des prélèvements d'eau souterraine et des indices de vulnérabilité DRASTIC – Guide technique*, 2019. 86 p., [En ligne], <http://www.environnement.gouv.gc.ca/eau/souterraines/drastric/guide.pdf>.

négligée dans les aires d'alimentation délimitées avec la méthode de traçage de particules, et les gradients transversaux des charges et des concentrations sont négligés dans un panache 2D simulé en coupe, et les gradients verticaux sont négligés dans un système 2D avec vue en plan.

6. DÉFINITION ET PRÉSENTATION DU MODÈLE DU SITE

6.1 Domaine

Pour les modèles analytiques ou numériques, l'étendue du domaine doit être claire, incluant la géométrie dans la vue en plan, et, si cela est pertinent, dans une ou plusieurs vues en coupes verticales. Les limites du modèle devraient figurer sur une carte, à une échelle appropriée, qui indique l'emplacement du modèle selon les conditions locales (ex. : rivières, ruisseaux, lacs, villages, fermes, chemins, puits, forêts etc.). La carte du domaine comprendra une échelle en mètres selon le système de coordonnées du site. Une combinaison avec une carte topographique est aussi recommandée.

6.2 Dimensionnalité

Dans le même chapitre du rapport, la dimensionnalité doit être donnée et justifiée selon le modèle conceptuel. Par exemple :

- Dans certains cas, un modèle 1D serait possible (ex. : un profil vertical à travers la zone non saturée, ou le long de l'axe central d'un panache très large dans la direction transversale).
- Un modèle 2D horizontal (xy) pourrait être justifiable si l'épaisseur est très faible par rapport à la longueur (de l'ordre de 10^{-2} ou moins) et si les gradients verticaux (gradients hydrauliques ou de concentration) sont faibles (c'est-à-dire les équipotentielles et les iso-contours de concentration sont verticales).
- Dans d'autres cas, un modèle 2D vertical serait possible (ex. : le long d'une ligne d'écoulement indiquée dans le plan horizontal, et sans puits; prendre note qu'une approche 2D verticale n'est jamais justifiable pour un modèle qui inclut un puits de pompage. Cette approche 2D verticale est recommandée si possible).
- Sinon, un modèle 3D doit être choisi (des systèmes 3D de symétrie radiale sont aussi possibles, mais rares). Dans les cas 3D, en plus de la vue en plan (ou plusieurs vues en plan au besoin, par exemple, dans chaque aquifère d'un système multi-aquifère), des coupes verticales devraient être tracées, dont les coupes les plus importantes selon le contexte de l'étude (ex. : une coupe qui passe à travers les puits de pompage ou qui s'aligne le long d'une ligne d'écoulement).

Des frontières de symétrie dans le domaine devraient aussi être indiquées, s'il y en a, et justifiées selon la géométrie du système.

Pour les modèles numériques, le maillage en espace doit être défini, incluant chaque dimension. Si la résolution du maillage est complexe et variable, au moins une image dans chaque dimension (vue en plan xy ou en coupe xz ou yz; ex. : fig 2) doit être fournie dans le rapport. Une image à petite échelle (magnifiée) pourrait être utilisée pour montrer les détails du maillage au besoin. Si le maillage est uniforme ou régulier, la taille des éléments (avec leur variabilité et leurs tailles minimales et maximales au besoin) pourrait être définie dans le texte ou dans un tableau.

La résolution du maillage devrait être justifiée, en montrant que le bilan de masse est respecté, ou en montrant qu'un maillage plus fin ne change pas les résultats de façon importante.

Pour un modèle de transport, il faut vérifier le maillage avec le nombre de Peclet (voir l'annexe 4) et avec un bilan de masse. Si le nombre de Peclet ne s'applique pas (parce que la vitesse est nulle), il faut noter les gradients transversaux de charge et de concentrations perpendiculaires à l'écoulement. Ces gradients

devraient être bien conservés avec un maillage adéquat, ce qui peut être confirmé avec un test de raffinement du maillage dans ces directions transversales, et avec un bilan de flux et de masse.

Une image qui montre les limites du modèle à l'échelle globale avec des images magnifiées superposées est souvent utile pour montrer des détails importants. Le lien, ou coordination, entre le maillage, la géométrie, l'hydrostratigraphie, les limites (ex. : eaux de surface) et d'autres conditions (ex. : puits de pompage) devrait être évident et clair dans le texte.

6.3 Discrétisation

La discrétisation en temps (les pas de temps) doit être également définie pour les modèles numériques transitoires, avec les valeurs minimales et maximales si le pas de temps est variable. La discrétisation en temps devrait être justifiée avec un bilan de masse et, dans le cas d'une simulation de transport, avec le nombre de Courant (annexe 4).

Pour les modèles numériques, la discrétisation dans l'espace et dans le temps (au besoin) devrait être justifiée selon la géométrie du système et les critères qui s'appliquent (ex. : Anderson et collab., 2015; Zheng et Bennett, 2002). Pour un modèle de transport, la résolution du maillage devrait satisfaire les critères de stabilité et d'exactitude donnés par le nombre de Peclet et le nombre de Courant, respectivement (voir l'annexe 4). D'autres critères peuvent s'appliquer selon le cas et le modèle choisi. Le rapport devrait indiquer si, et où, ces critères sont dépassés, et devrait montrer que les dépassements, s'il y en a, n'ont pas d'effet significatif sur les résultats (ex. : en utilisant une meilleure discrétisation pour le cas de base, et avec un bilan de flux et de masse acceptable).

Pour les modèles analytiques, bien qu'un maillage ne soit pas nécessaire, les points de calcul dans l'espace (coordonnées x, y et z au besoin) et dans le temps devraient être indiqués dans tous les cas. Comme exemple, on pourrait mentionner l'enveloppe des coordonnées x-y qui définissent une aire d'alimentation 2D, ou les rayons (r) pour les calculs du rabattement causé par le pompage dans un puits. Le seul critère pour les solutions analytiques étant la résolution adéquate des gradients (hydrauliques ou de concentration) dans les graphiques des isocontours, cette résolution dépendra de l'échelle du système et des gradients maximaux attendus.

Des exemples de maillages pour un modèle 3D, avec vue en coupe et vue en plan, sont montrés à la figure 2.

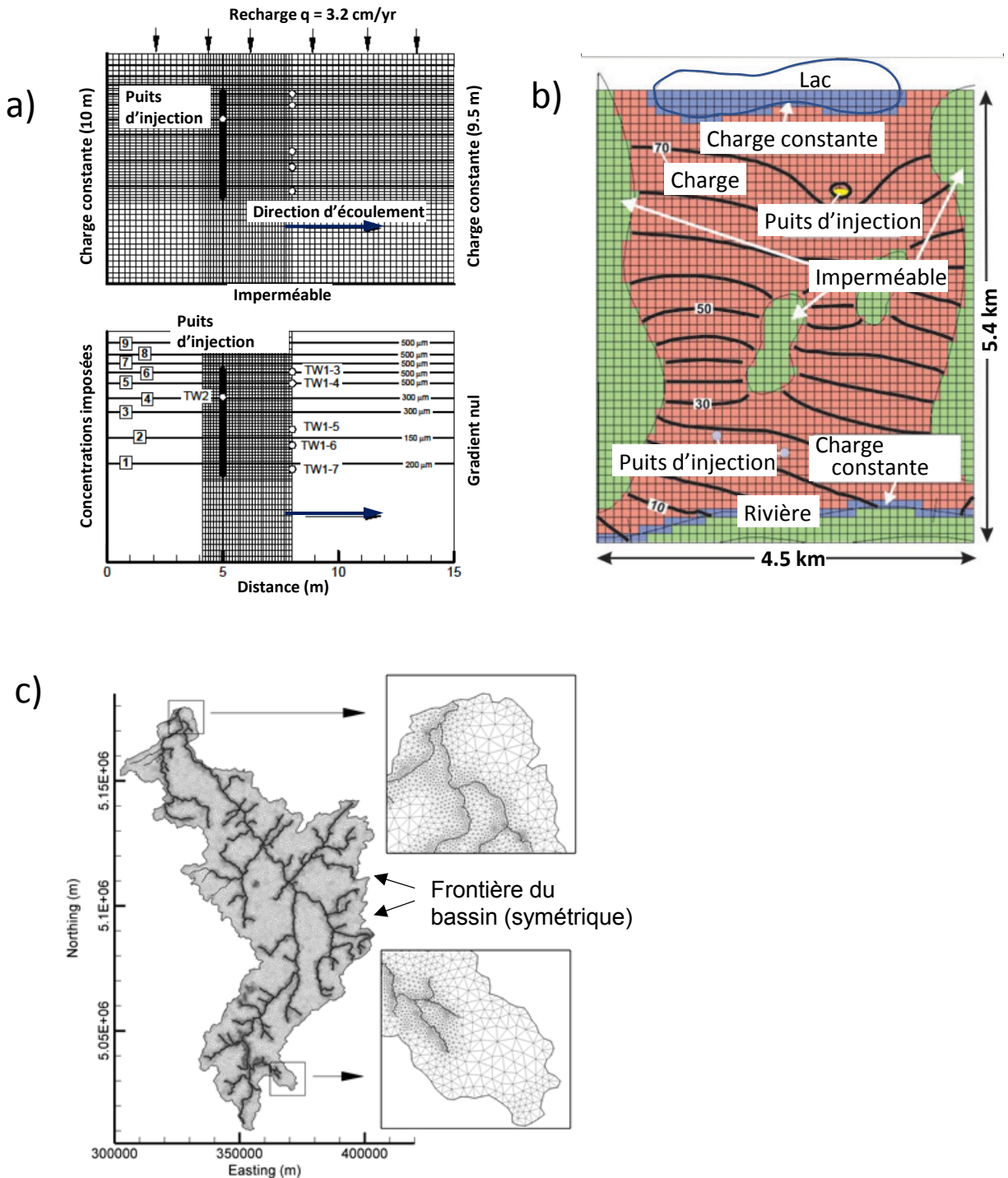


Figure 2 : Exemples de maillages et des conditions limites pour a) un modèle d'écoulement et du transport 3D, vue en coupe dans la direction d'écoulement à travers un puits d'injection, b) un modèle d'écoulement, vue en plan (d'après Konikow, 2011) et c) un maillage complexe pour un modèle 3D d'un bassin versant, vue en plan, avec des zones plus détaillées (d'après Benoit et collab., 2015).

7. CONDITIONS LIMITES ET CONDITIONS INITIALES

Toutes les conditions limites et les conditions initiales (au moins pour les systèmes transitoires) doivent être inscrites dans des figures ou des cartes. Les conditions limites et initiales doivent être indiquées pour chaque processus, écoulement et transport, et pour chaque composante (ex. : charge, concentrations de chaque espèce, température) incluse dans la modélisation.

Pour l'écoulement, il faut préciser les charges hydrauliques imposées (limite du type 1, dite de Dirichlet) et les flux imposés s'il y en a (limite du type 2, dite de Neumann), ainsi que les conditions du type 3 au besoin (type mixte; voir l'annexe 3). Si l'écoulement non saturé est inclus, les saturations ou pressions aux limites peuvent s'appliquer aussi. Toutes les équations et tous les paramètres pour les fonctions constitutives devraient être indiqués, ex. : les fonctions de masse volumique ou viscosité vs la température ou la concentration, les courbes de rétention d'eau (CRE; teneur en eau vs pression) et les courbes de gel/dégel : teneur en eau non gelée et perméabilité vs température).

Si ces conditions varient dans l'espace ou dans le temps, ces changements doivent être bien décrits pour chaque limite et doivent être justifiés.

Pour le transport de masse, il faut également indiquer les conditions limites qui s'appliquent, notamment les conditions les plus typiques : de type 1 (concentration imposée), type 2 (gradient imposé) et type 3 (flux de masse) au besoin. D'autres conditions pourraient s'appliquer aussi, selon le modèle.

Pour les systèmes transitoires, les conditions initiales doivent être mentionnées :

Pour l'écoulement : les charges, les vitesses, les saturations et les pressions au besoin.

Pour le transport de masse : les concentrations de chaque composé, les saturations et les fractions molaires pour les phases non aqueuses, et les fractions volumétriques des minéraux pour les systèmes géochimiques réactifs.

Pour le transfert d'énergie : les températures initiales.

Ces conditions doivent être inscrites le long de chaque limite du modèle, par exemple montrées sur une carte à la même échelle que celles qui sont utilisées pour indiquer les limites du domaine (en effet, la même carte est souvent utilisée). Dans le cas du 3D, les conditions limites et initiales devraient figurer dans la vue en plan (ou plusieurs vues en plan si les conditions varient en profondeur), ainsi que dans au moins une coupe verticale (ex. : dans la direction principale d'écoulement). Si les conditions sont hétérogènes (c'est-à-dire variables dans l'espace ou dans le temps), cette variabilité devrait être claire. Les détails de ces figures, incluant la justification des choix des conditions limites, devraient être ajoutés dans le texte.

Cette exigence s'applique aussi pour les modèles analytiques, bien que les limites spatiales pour quelques solutions analytiques se trouvent à une distance infinie.

Les figures 2 et 3 présentent des exemples de graphiques qui montrent comment présenter les conditions limites des modèles numériques.

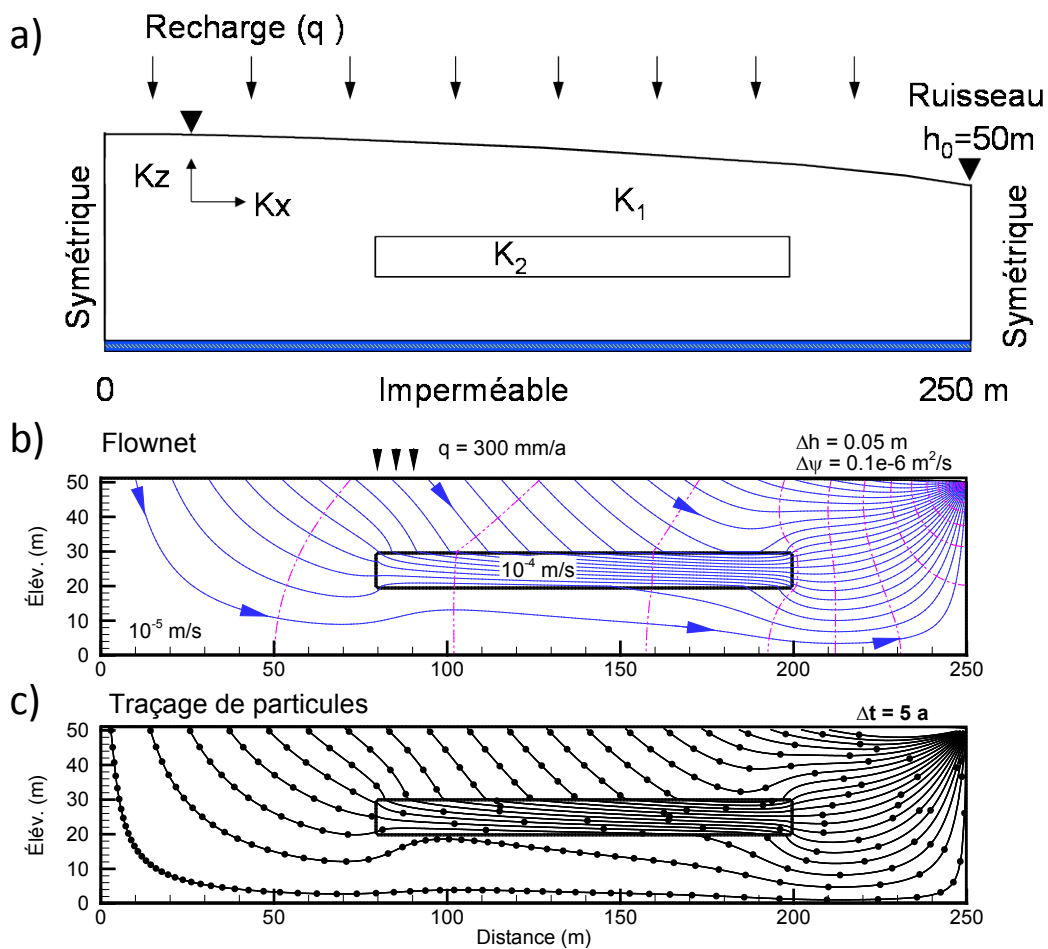


Figure 3 : Image graphique d'une simulation numérique d'écoulement 2D dans un système hétérogène, vue en coupe. a) Modèle conceptuel et conditions limites, montrant la structure hydrogéologique, b) le *flownet* (équipotentiels et lignes de courant; voir Molson et Frind, 2020; Toth, 2009) et c) traçage de particules (transport advectif), dont l'intervalle entre les points est de 5 ans. Noter la clarté et la simplicité des images, les échelles et les valeurs des isocontours.

8. HYDROSTRATIGRAPHIE ET PARAMÈTRES PHYSIQUES ET CHIMIQUES

Données (valeurs, points de contrôle, méthodes de traitement, transformation, interpolation)

Selon l'approche choisie, les données suivantes (ou un sous-ensemble) devraient faire partie du rapport, incluant leur distribution spatiale, l'anisotropie s'il y en a, et l'emplacement des points de mesure dans chaque cas :

1. Surfaces hydrostratigraphiques (incluant la topographie)
2. Caractéristiques des fractures (statistiques des ouvertures, longueurs, largeurs et orientations)
3. Conductivité hydraulique ou transmissivité
4. Porosités (totale et efficace)
5. Coefficient d'emmagasinement
6. Coefficients de la courbe de rétention d'eau (ex. : paramètres de van Genuchten ou Brooks-Corey)
7. Dispersivités (longitudinale, transversale horizontale et transversale verticale)
8. Coefficient de distribution (ou facteur de retard)
9. Les réactions géochimiques, les fractions volumétriques des minéraux et les taux de réaction
10. Caractéristiques physiques et chimiques des contaminants (ex. : masse volumique, masse molaire, solubilité, coefficient de diffusion moléculaire)
11. Conductivité thermique, capacité thermique, etc.

Il est critique dans un rapport d'ajouter ces paramètres et des données, mais aussi d'indiquer leur source, incluant la référence. La source des données est importante pour évaluer leur fiabilité et leur précision et pour déterminer si elles sont représentatives du site. Cette évaluation va dépendre, entre autres, si les données proviennent du site (ex. : mesurées sur place ou calibrées d'un autre modèle, etc.) ou si elles proviennent d'une référence générale des sols/formations semblables (ex. : sable, silt, roc fracturé) trouvée dans la littérature.

Quant aux données mesurées sur le site, la méthodologie, le protocole et les erreurs ou incertitudes, elles devraient être indiquées. Les plages de valeurs (ex. : min/max, moyennes, écarts-types, etc.) pourraient être incluses dans le texte ou un tableau (ex. : tableau 2), mais, pour les systèmes plus complexes, les variations devraient être montrées dans des graphiques (ex. : distribution hétérogène de K_x , K_y , K_z , vue en plan, vue en coupe). Les fichiers devraient être aussi disponibles (voir Archivage).

Les paramètres inconnus qui sont calibrés par le modèle doivent aussi être mentionnés.

Tableau 2. Exemple d'un tableau sommaire qui définit les paramètres importants dans un modèle 3D de l'écoulement et du transport réactif (avec une géométrie simple). Des graphiques seraient toujours nécessaires afin de montrer la vraie géométrie du système, les détails du maillage, l'hétérogénéité du système (variations des paramètres dans l'espace et dans le temps), etc.

Paramètre physicochimique	Valeur et variabilité testée	Références et sources possibles
Conductivité hydraulique K	Moyennes : $K_x = K_y = 1,0 \times 10^{-4}$ m/s $K_z = K_x/100$ m/s $K_{x_{\min}} = 2,0 \times 10^{-5}$ m/s $K_{x_{\max}} = 5,0 \times 10^{-4}$ m/s Écart-type (σ) : $2,0 \times 10^{-5}$ m/s	Rapports Essais de perméabilité Essais de pompage Calibrée (dans le modèle) Valeurs publiées en fonction du type de sol (sable, silt, argile)
Recharge q	200 mm/a, ± 20 %	Calibrée (dans le modèle) Estimation du bilan hydrique
Porosité θ	0,35 ± 10 %	Mesurée (essais au laboratoire) Valeurs publiées en fonction du type de sol (sable, silt, argile) Calibrée
Dispersivités (longitudinale, transversale horizontale et transversale verticale) α	$\alpha_L = 10,0$ m $\alpha_{TH} = 1,0$ m $\alpha_{TV} = 0,01$ m	α_L choisie selon l'échelle (ex. : Schulze-Makuch, 2005) $\alpha_{TH} = \alpha_L/10$ et $\alpha_{TV} = \alpha_L/1000$
Facteur de retard R	R = 2,0	Rapports; Valeurs publiées de K_d et f_{oc} du site
Taux de dégradation λ (+ d'autres paramètres cinétiques)	$\lambda = 10^{-4}$ s ⁻¹	Calibré (dans le modèle) Mesuré en colonnes au laboratoire Demi-vie connue
Discrétisation		
Discrétisation spatiale ΔL	1 m < ΔL < 100 m	Nombre de Peclet : $Pe < 2$
Discrétisation temporelle Δt	0,1 j < Δt < 10 j	Nombre de Courant : $Co < Pe/2$

9. CALIBRATION ET RÉSULTATS

La calibration d'un modèle numérique est la procédure où les caractéristiques d'un modèle (ex. : paramètres, processus, conditions limites, etc.) sont ajustées pour que les simulations deviennent cohérentes avec les observations (ex. : charges hydrauliques, flux, concentrations). Il existe plusieurs approches de calibration, dont les approches directe et inverse.

Avec la méthode directe, les paramètres indépendants (ex. : K , θ) sont ajustés et les variables dépendantes (charges ou concentrations, par exemple) sont comparées avec les données observées (fig. 4). Avec la méthode inverse, les variables de charges ou concentrations observées sont utilisées pour déterminer ces paramètres. Dans les deux cas, la stratégie et l'approche de calibration, ainsi que le type et la source des données observées, doivent être bien indiquées dans le rapport. Le rapport de modélisation doit comprendre les résultats de la calibration, incluant une évaluation et une discussion des écarts entre la simulation et les observations, et mentionner si les écarts sont significatifs. Les directives standards sur les méthodes de calibration et la présentation des résultats sont données par ASTM (2008).

Les résultats de la calibration peuvent être montrés sous plusieurs formes. Des cartes spatiales (vue en plan, vue en coupe) qui montrent les données observées superposées sur les résultats simulés sont typiques (ex. : fig. 4a). Les données observées elles-mêmes sont normalement interpolées sur la carte, mais dans tous les cas il est important d'inscrire sur la carte les points de mesure et la méthode d'interpolation. Cette méthode est utile pour souligner les écarts dans l'espace, mais elle est relativement subjective.

Un tableau devrait être ajouté, pour lister les données observées, les valeurs simulées aux mêmes points des observations (ou aux nœuds les plus proches) et les différences entre eux. Ce tableau pourrait être utilisé également pour tracer un graphique standard de calibration, qui montre les données observées (axe des x) vs les valeurs simulées (axe des y) (ex. : fig. 4b). Une droite de 45° est ajoutée pour souligner la corrélation (concordance), et les écarts-types de $\pm 1\sigma$ pourraient être tracés.

En plus, des statistiques des erreurs devraient être calculées à partir d'un tel tableau. Quatre calculs d'erreurs sont les plus souvent utilisés : l'erreur moyenne (ME), l'erreur absolue moyenne (MAE), l'erreur quadratique moyenne (RMSE) et l'erreur absolue (AE) (fig. 4c).

Évidemment, il existe plusieurs autres méthodes pour montrer la calibration d'un modèle, selon le type de données. Par exemple, le flux de masse observé à travers une clôture de plusieurs puits d'observation pourrait être comparé au flux simulé par le modèle vs le temps (ex. : fig. 5a). Ce flux est calculé à partir des produits intégrés des concentrations ponctuelles, des flux de Darcy et de l'aire transversale locale. Cette approche d'utiliser les données intégrées est souvent utile parce qu'elle tend à masquer des variations et des oscillations locales ou ponctuelles (dans l'espace ou dans le temps) qui sont moins importantes, ce qui permet de focaliser la calibration sur les tendances plus importantes. Des données ponctuelles (ex. : charges, concentrations ou températures) mesurées à un seul puits d'observation dans le temps ou à plusieurs points (ex. : aux puits multiniveaux) pourraient être aussi comparées aux valeurs simulées (fig. 5b). Pour mieux mettre en contexte les écarts entre les simulations et les observations, il est important aussi d'inclure les erreurs d'observation (ex.: erreurs de mesures, limites de détection) sur les données observées (ex. : fig. 5a).

En pratique, un écart entre les observations et les simulations de $\pm 10\%$ ou $\pm 1\sigma$ (1 écart-type) est considéré comme acceptable.

Prendre note qu'il n'y a pas toujours un lien direct entre la fiabilité d'un modèle conceptuel et la précision de la calibration. Bredehoeft (2003), par exemple, note qu'un mauvais modèle conceptuel peut souvent

être bien calibré, et également qu'une bonne calibration ne veut pas dire que le modèle conceptuel est fiable. Dans ces cas, les prédictions du modèle pourraient être non fiables ou irréalistes.

La solution est de réduire les incertitudes dans le modèle, en déterminant les paramètres de calibration indépendamment du modèle (ex. : essais de terrain). L'incertitude de calibration peut être réduite aussi en utilisant plusieurs types de données observées, par exemple avec une combinaison de charges hydrauliques, concentrations et températures. Cependant, cette approche n'est pas toujours évidente parce que, dans ce cas, le modèle devient plus complexe aussi (Konikow, 2011). Dans le contexte d'une évaluation de la fiabilité d'un modèle calibré, il est donc critique que le rapport justifie l'approche choisie, reconnaisse les incertitudes et présente une discussion des limitations et des hypothèses.

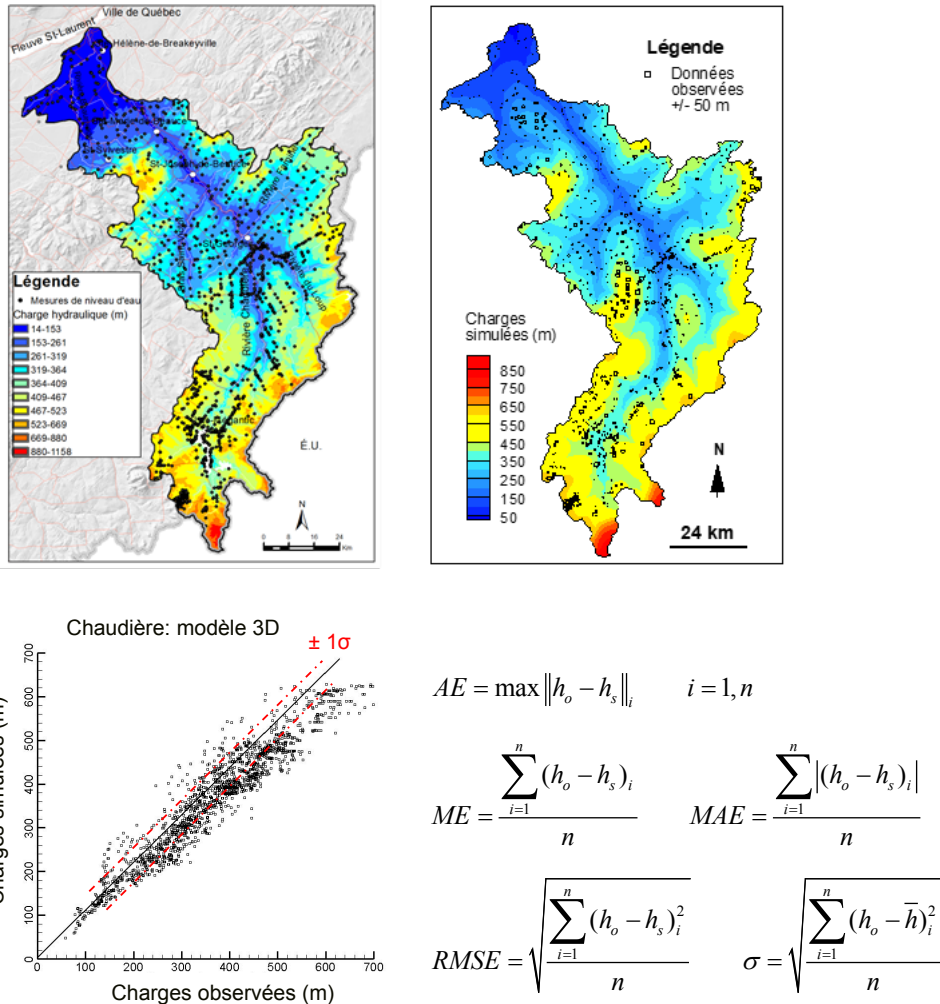


Figure 4 : Exemples des méthodes de présentation d'une calibration : a) graphique montrant les isocontours des charges observées et charges simulées, vue en plan avec les écarts aux points discrets d'observation, b) graphique de calibration x-y du même modèle d'écoulement basé sur les charges hydrauliques, avec les limites de précision $\pm 1\sigma$ (σ = l'écart-type), ainsi que c) les formules d'erreurs de calibration typiquement utilisées : erreur absolue (AE), erreur moyenne (ME), erreur moyenne absolue (MAE), erreur quadratique moyenne (RMSE) et écart-type (σ).

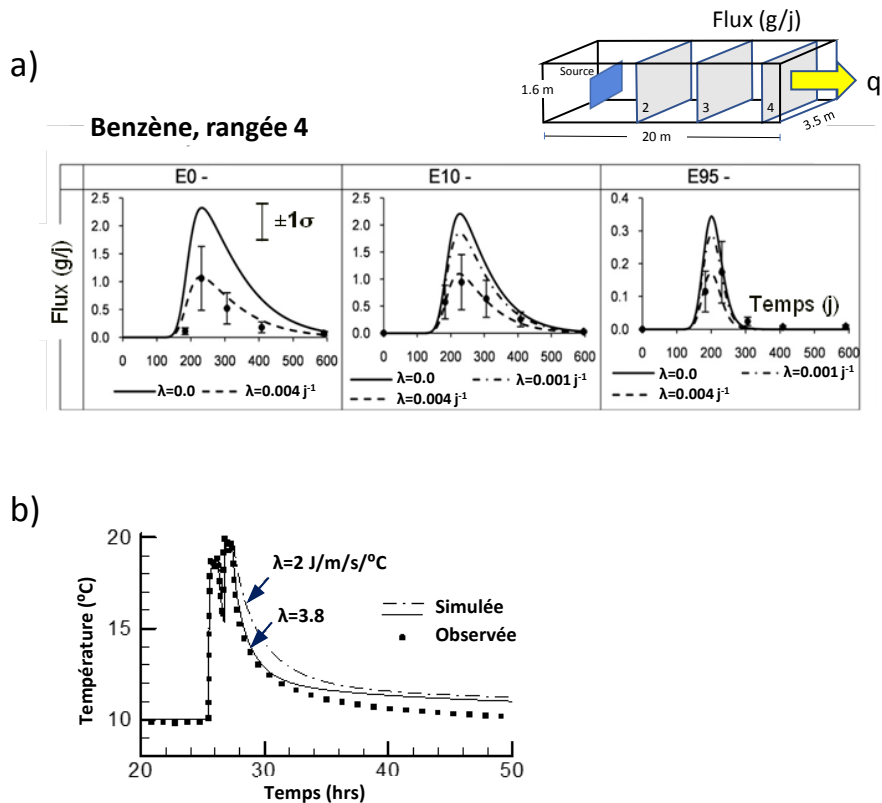


Figure 5 : Exemples de graphiques de calibration : a) flux de masse observé (symboles) vs simulé, à travers une clôture de puits d'observation, montrant les limites de $\pm 1 \sigma$ pour les flux observés, et avec une analyse de sensibilité des taux de dégradation (λ) d'un contaminant organique (d'après Freitas et collab., 2010), b) comparaison des températures observées et simulées lors d'un essai de traçage thermique (d'après Greer et collab., 2010).

Les figures 6 à 9 montrent plusieurs exemples des formats typiques pour illustrer les résultats d'un modèle numérique dans un rapport de modélisation. Dans le contexte d'un système d'écoulement et de protection des ressources en eau, les figures 6 à 7 montrent les aires de captage pour des puits municipaux, simulées avec la méthode de traçage de particules en 3D. Prendre note que les résultats sont montrés dans le plan horizontal et dans une coupe verticale. Dans les deux cas, il s'agit des projections des cheminements 3D vers le plan. Les perspectives 3D des traçages sont possibles aussi, mais elles sont souvent difficiles à visualiser et à comparer. Les cartes de références (le réseau de routes, l'hydrostratigraphie en coupe, etc.) sont aussi montrées aux figures 6a et 6b.

La figure 8 montre plusieurs exemples de graphiques 2D et 3D des résultats de modélisation, pour les systèmes d'écoulement ou le transport de masse, âge ou énergie. Les figures 8a, 8b et 8c sont en 2D, la figure 8d est en vue 3D tranchée, tandis que les figures 8e et 8f sont en vue 3D perspective. Dans chaque cas, les échelles en espace et les valeurs des isocontours sont indiquées, et les graphiques sont bien annotés avec le temps de simulation, les unités, etc.

Deux exemples de transport advectif-dispersif simulé en 3D sont donnés à la figure 9. Les figures 9 a, b et c montrent plusieurs perspectives du même panache de contamination dans un milieu poreux. La figure 9a montre les vues en plan de l'étendue maximale en profondeur du panache aux temps sélectionnés, tandis que la figure 9b montre le même panache en coupes verticales. Une perspective 3D

est montrée à la figure 9c. La figure 9d montre une vue en plan (concentrations maximales en profondeur) d'un autre panache dans un milieu fissuré.

Dans les vues en plan, les isocontours de concentrations devraient être superposés sur les cartes des sites locaux pour donner une référence spatiale. Le système d'écoulement devrait être montré aux mêmes échelles, soit superposé sur la structure hydrogéologique (ex. : fig. 9b), soit avec la distribution des concentrations (ex. : fig. 9d). Dans un rapport, ces simulations doivent être indiquées dans un tableau qui énumère les conditions applicables. Toutes les comparaisons doivent être montrées avec les mêmes échelles et isocontours. Plusieurs simulations dans le temps qui montrent, par exemple, la migration d'un panache ou l'évolution d'une zone contaminée pendant sa réhabilitation sont très utiles pour visualiser et comprendre le comportement du système et pour mieux détecter des erreurs numériques, s'il y en a.

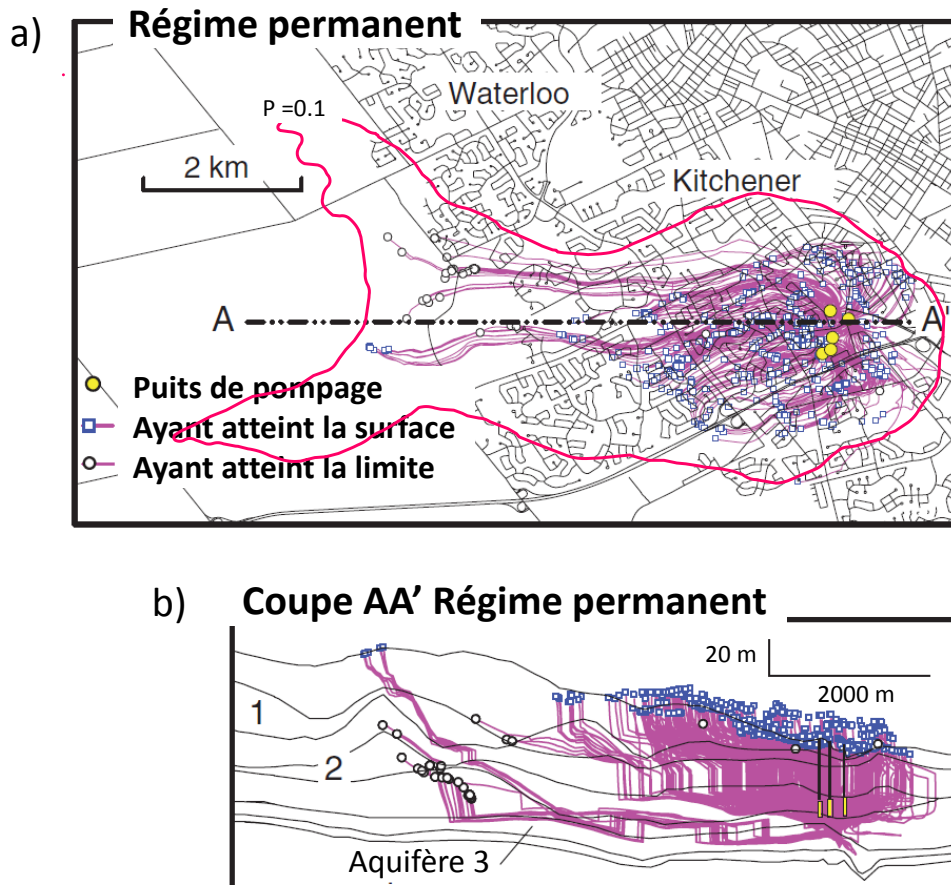


Figure 6: Exemple d'une aire de captage en régime permanent (280 ans) pour 5 puits d'alimentation de Greenbrook, Ville de Kitchener-Waterloo (Ontario), basée sur un modèle 3D et la méthode de traçage de particules, a) vue en plan, b) vue en coupe. L'enveloppe est basée sur un modèle de transport de probabilités qui représente l'étendue de l'incertitude intégrée de l'aire de captage (isocontour de probabilité de captage $P = 0,1$ montrée). Modifiée après Frind et Molson (2018).

Pour la présentation de modèles 3D, des images en isocontours 3D (perspectives) devraient être limitées à des cas spéciaux, comme le montre la figure 9c. Les images 2D (ex. : coupes verticales et horizontales dans les systèmes 3D) ou en « clôtures » (plusieurs coupes 2D verticales croisées) sont préférées en raison de leur simplicité, de leur clarté et de la difficulté de comparer des images 3D.

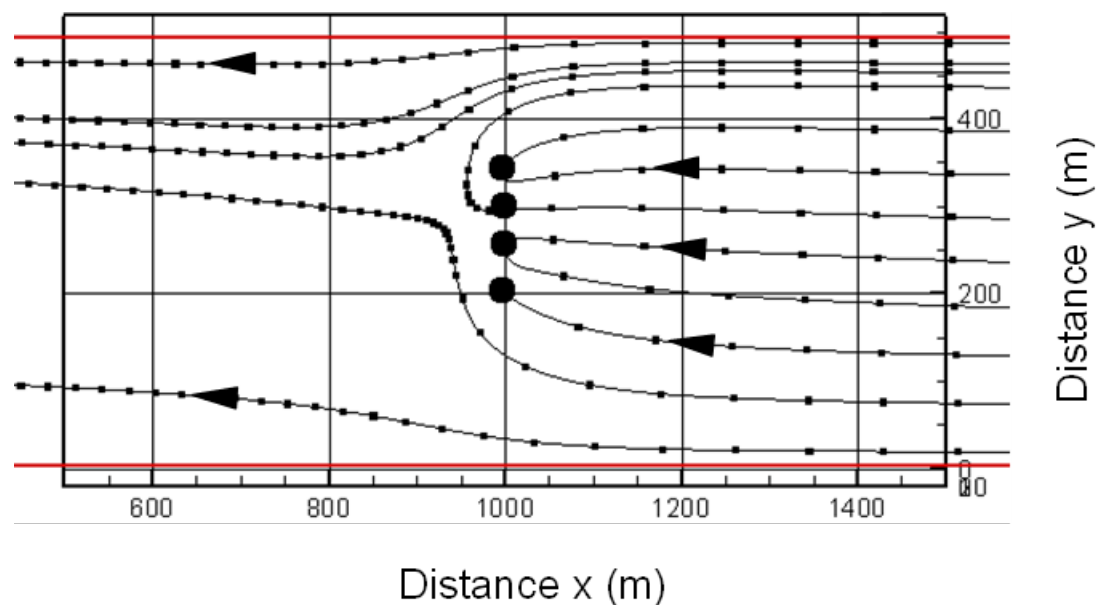


Figure 7 : Exemple d'un système d'écoulement simulé en 3D, vue en plan (xy), montrant les lignes d'écoulement près d'une série de puits de pompage. La période entre chaque point est uniforme, soit 10 jours.

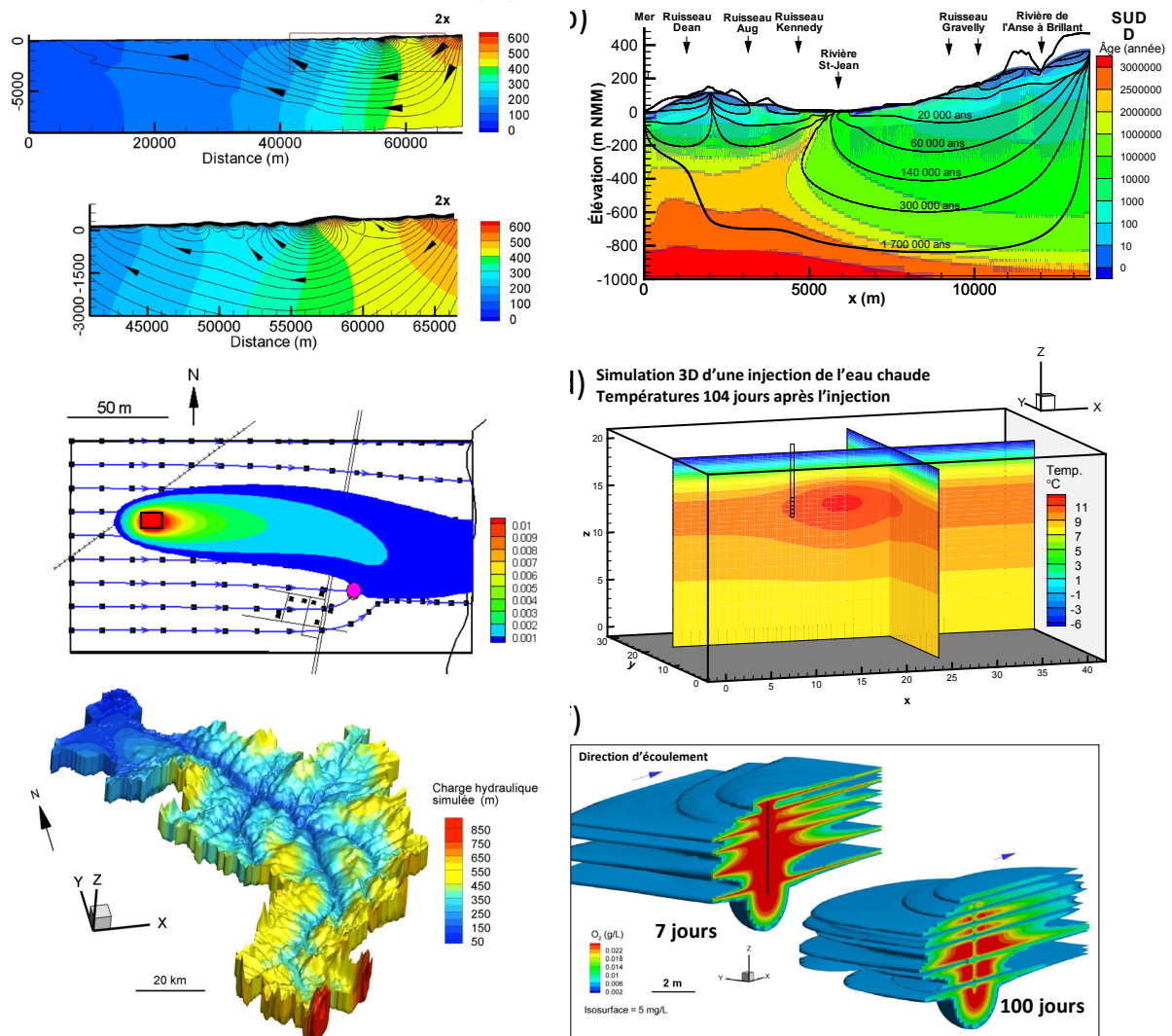


Figure 8 : Exemples des méthodes de présentation des résultats d'un modèle numérique : a) un système d'écoulement en coupe verticale montrant les charges hydrauliques et les lignes d'écoulement (d'après Janos et collab. 2018), b) un système hydrogéologique profond montrant les âges des eaux souterraines en régime permanent et les temps de résidence le long des lignes d'écoulement (d'après Raynauld et collab. 2014), c) un panache du TCE, concentrations maximales, vue en plan, d) la distribution de température lors d'une injection d'eau chaude dans le contexte de stockage thermique, e) un système d'écoulement dans un bassin versant, charges hydrauliques simulées en 3D, vue en plan (xy), f) les concentrations en oxygène dissous simulées après une période d'injection de 7 jours, lors de la restauration d'une nappe contaminée (d'après Greer et collab., 2010). Noter les légendes, isocontours, échelles, points de référence, annotations et orientations bien indiquées.

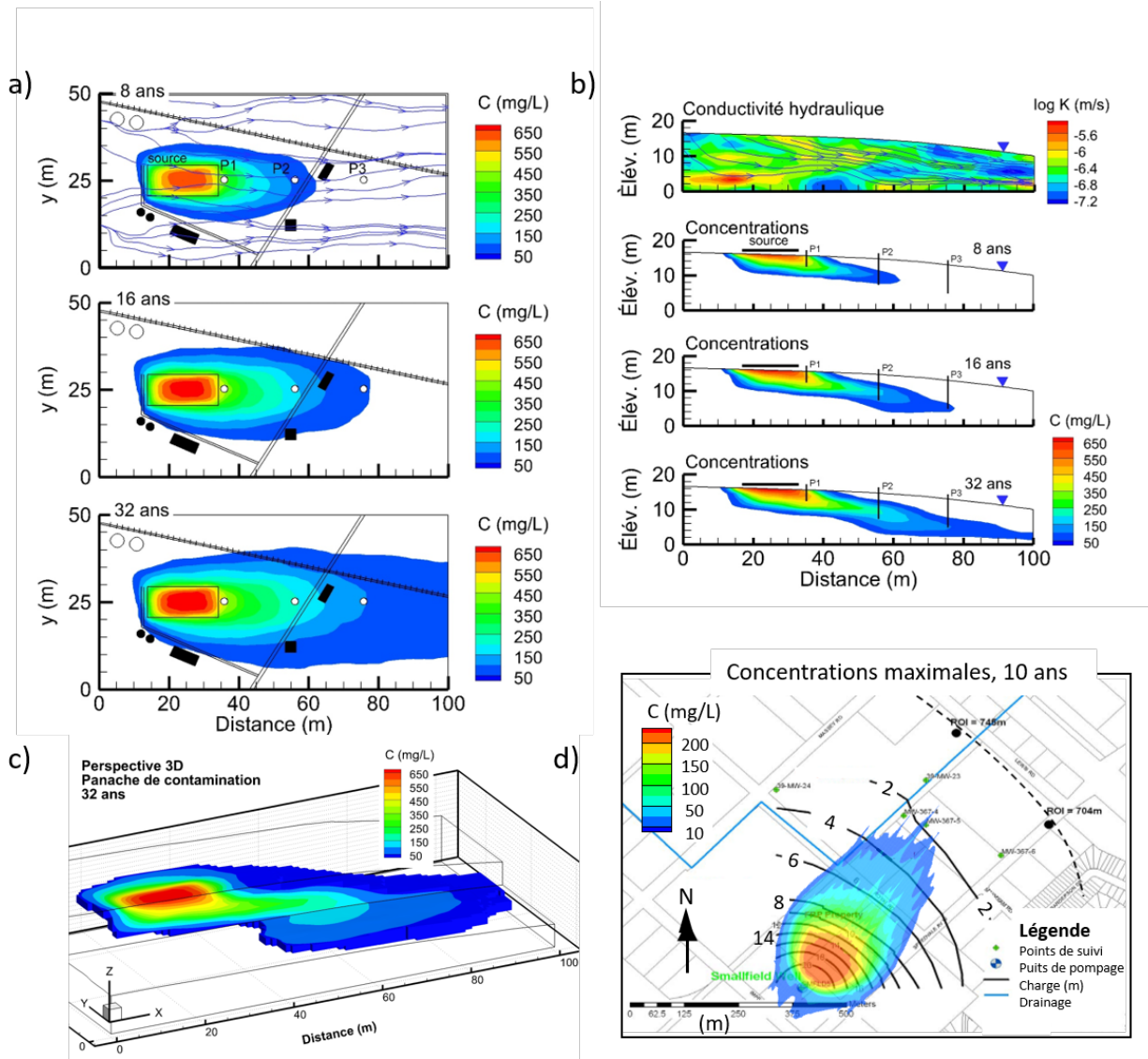


Figure 9 : Exemples des présentations de simulations de transport advectif-dispersif en 3D. Un panache d'un contaminant dissous montré en a) concentrations maximales vues en plan, b) concentrations vues en coupe longitudinale et c) vue 3D perspective. Fig. 9d : concentrations d'un contaminant dans un milieu fissuré, vue en plan, concentrations maximales en profondeur. Noter les systèmes d'écoulement superposés (lignes d'écoulement ou charges hydrauliques), les échelles et l'annotation. Les perspectives 3D sont difficiles à comparer (entre plusieurs scénarios, par exemple) et ne sont pas toujours utiles.

10. ANALYSE DE SENSIBILITÉ ET DE L'INCERTITUDE

L'incertitude existe dans toutes les simulations analytiques et numériques, dans les conditions dans le passé, les conditions actuelles ou futures. Une analyse de sensibilité est utilisée pour circonscrire les paramètres qui jouent les rôles les plus importants sur le comportement du système, tant pour la calibration que pour les simulations prédictives. Une telle analyse devrait faire partie du rapport.

Tandis qu'un paramètre pourrait être insensible pour une calibration, il peut toujours avoir un effet sur les prédictions. Par contre, un modèle peut être sensible à un paramètre, mais, si les conclusions ne changent pas (ex. : dans tous les cas, un seuil de concentration n'est pas dépassé), on peut dire que l'effet de sensibilité n'est pas important. Il faut effectuer une telle analyse pour déterminer le contexte.

Le non-unicité est un autre effet dont il faut tenir compte dans une analyse de sensibilité. Un exemple typique est un système d'écoulement où la recharge q et la conductivité hydraulique K font partie d'une analyse de sensibilité. Dans un tel système, la loi de Darcy ($q = -K \nabla h$) montre que les gradients ne dépendent que du ratio de q/K , donc toutes les combinaisons de q et K qui donnent le même ratio vont donner le même gradient de charges, peu importe les valeurs de q et K . Dans ce cas, le ratio de q/K semblerait insensible. Cependant, les vitesses d'écoulement (donc les débits dans les cours d'eau connexes), s'il y en a, sont très sensibles aux valeurs uniques de q et K étant donné $v = q/\theta$. Dans le contexte d'une calibration aux charges, on peut dire que les paramètres q et K sont corrélés. Dans ce cas, par exemple, les vitesses d'eau souterraine (ou débits) observées seraient utiles pour trouver uniquement les valeurs de q et K .

Dans une analyse de sensibilité, une cible doit être choisie, c'est-à-dire qu'il faut déterminer comment mesurer la sensibilité. Typiquement, on inclut l'erreur de calibration – le modèle calibré est relancé pour chaque nouvelle variable et l'erreur de calibration (ex. : la RMSE pour les charges ou concentrations) est recalculée. En variant les paramètres autour des valeurs calibrées, on s'attend à voir une erreur minimale à la valeur calibrée.

D'autres critères ou cibles pourraient être également utilisés dans une analyse de sensibilité, pour les prédictions. Par exemple, les concentrations prédites dans le temps à un puits de pompage ou une zone de résurgence pourraient être montrées pour chaque nouvelle simulation; les résultats pour chaque valeur d'un paramètre pourraient être superposés et comparés.

Un rapport de modélisation devrait inclure une analyse de sensibilité afin de tenir compte de cet effet en indiquant les paramètres corrélés.

La figure 10 (a et b) montre un exemple d'une analyse de sensibilité lors d'une simulation d'une aire d'alimentation pour un puits municipal. L'aire d'alimentation simulée pour un modèle conceptuel unique est montrée à la figure 10a, tandis que l'aire moyenne simulée à partir de plusieurs modèles conceptuels équiprobables (avec une plage de valeurs de K et recharge q) est montrée à la figure 10b. On peut constater que l'étendue de l'aire moyenne est beaucoup plus grande que celle qui est simulée avec un seul modèle conceptuel. On peut dire aussi que l'aire moyenne est plus fiable et sécuritaire. La figure 10c montre une analyse de sensibilité de la recharge sur l'erreur de calibration d'un modèle d'écoulement, tandis que la plage d'incertitude des concentrations simulées dans un puits de suivi est montrée à la figure 10d.

Les mêmes approches peuvent être appliquées dans d'autres contextes, par exemple pour l'analyse des systèmes de réhabilitation des nappes. Le rapport doit mentionner quels paramètres étaient testés (ex. : K , q , θ , etc.) et quelles variables dans le modèle étaient vérifiées (ex. : charge, flux, concentrations, etc.). Le rapport doit justifier les variations imposées aux paramètres. Typiquement, des valeurs minimales et maximales observées (ou attendues) devraient être utilisées, tandis que certaines valeurs par rapport aux valeurs moyennes observées pourraient être utilisées aussi (ex. : $\pm 3\sigma$; pour K on prend σ de $\log K$). Si

ces données extrêmes n'existent pas, il faut utiliser un jugement informé pour choisir les valeurs selon les risques, hétérogénéités attendues, etc.

L'approche choisie pour tenir compte de l'incertitude devrait être clairement indiquée. Deux approches sont typiquement utilisées : une analyse de scénarios et une analyse stochastique. Dans chaque cas, la plage des valeurs des paramètres doit être précisée et justifiée selon les données disponibles ou selon les références.

Dans le contexte concernant l'exposition à un contaminant et la santé publique, Oreskes (1998) a décrit quatre types d'incertitudes :

1. *Incertaines théoriques*
Incompréhensions par rapport au processus en cause, donc manque de description théorique pour ces processus.
2. *Incertaines empiriques*
Facteurs qui ne peuvent être mesurés ou précision des valeurs mesurées limitée.
3. *Incertaines paramétriques*
Erreurs introduites lorsque la complexité d'un phénomène est réduite à un seul paramètre.
4. *Incertaines temporelles*
Surviennent lorsque le système est considéré stable dans le temps.

De son côté, Hunt (2017) a aussi décrit cinq principes d'incertitude :

1. Si l'incertitude n'est pas tenue en compte, cela veut dire que chaque composante est connue exactement.
2. On ne peut pas connaître tous les inconnus d'un système d'écoulement et des conditions futures. On ne peut jamais déterminer une « vraie » mesure de l'incertitude.
3. Il n'existe pas une méthode « uniforme » pour déterminer l'incertitude.
4. Certains résultats de modélisation sont moins certains que d'autres.
5. La manière de relier l'incertitude aux utilisateurs est normalement plus importante que la complexité de la méthode utilisée.

Dans tous les cas, dans le contexte de modélisation numérique des systèmes hydrogéologiques, Hunt (2017) a constaté que, « peu importe l'approche utilisée pour inclure l'incertitude, accepter qu'il existe des facteurs que l'on ne connaît pas est la meilleure façon de gagner l'approbation pour les facteurs qu'on comprend bien ».

11. DISCUSSION

- Les notions importantes de la structure du modèle, incluant la cohérence avec le modèle conceptuel, la disponibilité, la qualité et la fiabilité des données observées et les répercussions des incertitudes et des lacunes dans les données sur la fiabilité des résultats et sur l'interprétation du comportement du système.
- Une discussion sur l'importance et l'influence des résultats, par exemple les directions et les vitesses d'écoulement, l'étendue et la forme des aires d'alimentation, des panaches des contaminants ou de la chaleur, etc.
- Une discussion au sujet des résultats par rapport à leur fiabilité, à la précision de la calibration, aux simulations et aux prédictions et leurs comparaisons, et au sujet de la cohérence entre les résultats du modèle et ceux du modèle conceptuel original. Au besoin, un nouveau modèle conceptuel pourrait être proposé.

- Les hypothèses (suppositions) et limitations du modèle.
- Les erreurs du modèle : le bilan de flux, bilan de masse et leurs effets sur les résultats.

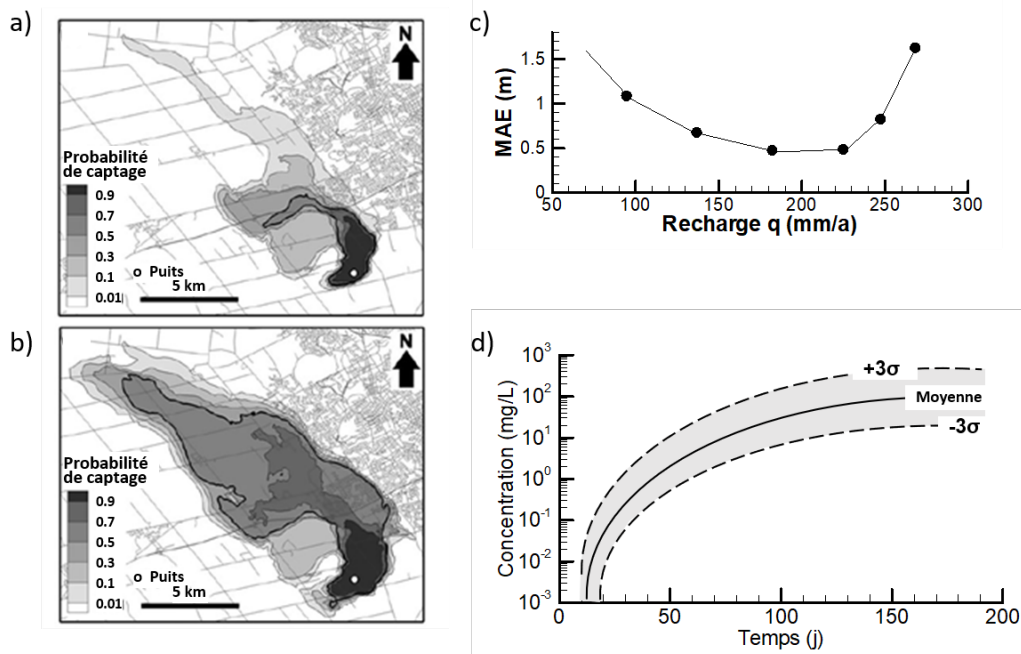


Figure 10 : Exemples des analyses d'incertitude et de sensibilité; a et b) une analyse d'incertitude d'une aire de captage, basée sur la méthode de probabilité de captage (transport inverse), d'après Frind et ses collaborateurs (2014). a) Aire d'alimentation selon un seul scénario, b) l'enveloppe des aires selon plusieurs scénarios équiprobables (variations des taux de recharge, K, etc.). La même approche pourrait être utilisée avec les traçages de particules; c) analyse de sensibilité de la recharge q (mm/a) dans un système d'écoulement – Variation de l'erreur moyenne absolue des charges vs le taux de recharge. L'erreur minimale se trouve à $q = 200$ mm/a qui représente la meilleure estimation selon la calibration. d) Incertitude dans les prédictions des concentrations dans un puits de pompage en milieu hétérogène – montrant la moyenne et $\pm 3\sigma$ de 100 simulations Monte Carlo de K équiprobables.

12. CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS

Les conclusions devraient faire référence et répondre aux objectifs du modèle et présenter un sommaire des résultats principaux et leur importance. Des références spécifiques et quantitatives par rapport au comportement du système devraient être incluses (ex. : vitesses de l'écoulement, rabattement, distances de migration, étendue des aires de protection ou des panaches de contaminants, concentrations et températures aux récepteurs, etc.). Cette section peut aussi inclure des recommandations, par exemple, comment améliorer le modèle (données supplémentaires à collecter, d'autres simulations ou tests à effectuer, d'autres modèles conceptuels à vérifier, etc.).

13. ARCHIVAGE

Le modélisateur doit conserver tous les aspects du modèle pour que les résultats puissent être reproduits plus tard indépendamment, par une tierce partie par exemple. Cet objectif doit permettre de vérifier les simulations, de modifier le format de présentation, de corriger des fautes, de mettre à jour le modèle avec de nouvelles données, de tester d'autres modèles conceptuels ou d'ajouter d'autres scénarios de prédiction.

Il faut donc conserver tous les fichiers des données d'entrée (*input data*) du logiciel (paramètres, maillage, fichier de formes de systèmes d'information géospatiale, etc.) ainsi que tous les résultats de sortie, en format original numérique et les données et résultats traités par un logiciel préprocesseur (format ASCII ou en format compatible avec le modèle ou logiciel graphique/préprocesseur). Lorsque cela est pertinent, les métadonnées devraient être aussi disponibles (données et fiches descriptives qui expliquent la provenance et qui définissent les autres données). Un tableau est fortement recommandé pour inventorier ces fichiers, leur contenu et format.

L'archive de données devrait être protégée sur de nombreux sites, les démarches nécessaires pour les télécharger devraient être claires et les coordonnées du modélisateur devraient être disponibles.

Dès le début du projet, les droits d'auteur de ces fichiers doivent être clairs.

14. ERREURS ET FAIBLESSES TYPIQUES À ÉVITER

Les erreurs et faiblesses les plus typiques que l'on trouve dans des rapports de modélisation sont les suivantes :

1. Manque d'une description du modèle conceptuel avec (au moins) une coupe verticale.
2. Conditions limites non indiquées ou non justifiées.
3. Graphiques incomplets (absence d'échelles ou échelles différentes parmi les graphiques, manque de libellés, facteur d'exagération, valeurs des isocontours, points d'observation, résolution trop faible, etc.).
4. Graphiques mal conçus, figures copiées de l'écran ou perspective 3D trop complexe ou pas claire.
5. Paramètres non indiqués ou non justifiés et sans références.
6. Manque de détails pour la calibration (points de contrôle, erreurs, discussion).
7. Manque de liens entre le modèle numérique et le modèle conceptuel.

8. Présentation des résultats sous forme de graphiques x-y (ex. : charges ou concentrations vs temps) sans avoir d'abord présenté les résultats en espace (ex. : équipotentielles, lignes de courant, isocontours de concentration).
9. Absence d'une analyse de sensibilité.
10. Limitations et suppositions non indiquées.

15. SYNTHÈSE

Un bon rapport de modélisation, bien rédigé, est la clé pour transmettre les connaissances acquises par le modélisateur vers l'utilisateur. Il faut que le rapport soit clair et compréhensible pour l'utilisateur des résultats, qui est souvent une partie prenante qui n'est pas experte dans ce domaine. En particulier, ce que le modèle peut faire et ne peut pas faire doit être communiqué au lecteur.

On peut considérer les facteurs suivants comme critiques dans un rapport de modélisation :

- La clarté des objectifs des travaux de modélisation.
- La description détaillée du modèle conceptuel (structure, étendue, conditions limites, conditions initiales, etc.) et la qualité et les détails des graphiques conceptuels (incluant la vue en plan, la vue en coupe et en 3D).
- Une discussion sur les sources et la représentativité des données d'entrée et les processus inclus dans le modèle, tant pour l'écoulement que pour le transport.
- Une explication détaillée du processus de calibration et une discussion sur la représentativité des paramètres calibrés.
- Une discussion sur la fiabilité du modèle prédictif.
- Une discussion sur les incertitudes dans les données, le modèle conceptuel, les paramètres choisis et les résultats du modèle.
- Les graphiques de simulation sont bien annotés (échelles, légendes, facteurs d'exagération, emplacement des coupes, points de contrôle, etc.).
- Les hypothèses et limitations du modèle sont bien indiquées.
- Une description détaillée de l'archivage (fichiers de données d'entrée, fichiers des données de sortie, bases de données, etc.).

➔ **Après avoir lu un tel rapport, le lecteur devrait être à l'aise de dire oui, je comprends le modèle conceptuel, je comprends les résultats et je comprends leurs limitations et incertitudes. Porter un œil critique.**

16. RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- ALLEY, W.M., T.E. REILLY et O.L. FRANKE, *Sustainability of ground-water resources*, U.S. Geological Survey circular: 1186, 1999.
- ANDERSON, M.P., W.W. WOESSNER et R.J. HUNT, *Applied Groundwater Modeling*, 2nd Edition, Elsevier, 2015.
- ANDERSON, M.P., et W.W. WOESSNER, « The role of the postaudit in model validation », *Advances in Water Resources*, 15, 167-173, 1992.
- ASTM International, *Standard Guide for Calibrating a Ground-Water Flow Model Application*, D5981-96(2008), 2008.
- ASTM International, *Standard Guide for Documenting a Groundwater Flow Model Application*, D5718-13(2013), 6 p., 2013.
- ASTM International, *Standard Guide for Conducting a Sensitivity Analysis for a Groundwater Flow Model Application*, D5611-94(2016), 2016.
- BARNETT, B., L.R. TOWNLEY, V. POST, R.F. EVANS, R.J. HUNT, L. PEETERS, S. RICHARDSON, A.D. WERNER, A. KNAPTON et A. BORONKAY, *Australian Groundwater Modelling Guidelines*, Waterlines Report Series n° 82, National Water Commission, Canberra, 191 p., <http://www.groundwater.com.au/>, 2012.
- BENOIT, N., J.W. MOLSON, M.Y. BRUN KONÉ et M. NASTEV, *Modèle hydrogéologique 3D du bassin versant de la rivière Chaudière*, Geological Survey of Canada, Open File 7734, 32 p., [doi:10.4095/295674](https://doi.org/10.4095/295674), 2015.
- BREDEHOEFT, J.D., « From Models to Performance Assessment: The conceptualization problem », *Groundwater*, 41: 571-577, doi:[10.1111/j.1745-6584.2003.tb02395.x](https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2003.tb02395.x), 2003.
- CCA, *La Gestion durable des eaux souterraines au Canada*, Conseil des académies canadiennes, ISBN 978-1-926558-12-7, 2009.
- CLEMENT, T.P., « Complexities in hindcasting models: When should we say enough Is enough? », *Groundwater*, 49: 620-629, doi:[10.1111/j.1745-6584.2010.00765.x](https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2010.00765.x), 2011.
- DE MARSILY, G., P. COMBES et P. GOBLET, « Comment on “Ground-water models cannot be validated” », *Adv. Water Resources*, v.15, 367-369, 1992.
- DIERSCH, H-J. G., *FEFLOW: finite element modeling of flow, mass and heat transport in porous and fractured media*, Springer Berlin Heidelberg, 996 p., 2014.
- FREITAS, J., M. MOCANU, J.L.G. ZOBY, J. MOLSON et J. BARKER, « Migration and fate of ethanol-enhanced gasoline in groundwater: A modelling analysis of a field experiment », *Journal of Contaminant Hydrology*, 119: 25-43, doi: [10.1016/j.jconhyd.2010.08.007](https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2010.08.007), 2010.
- FRIND, E., D. MUHAMMAD et J. MOLSON, « Delineation of three-dimensional well capture zones for complex multi-aquifer systems », *Groundwater*, 40: 586-598. doi:[10.1111/j.1745-6584.2002.tb02545.x](https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2002.tb02545.x), 2002.

- FRIND, E.O. et J.W. MOLSON, « Issues and options in the delineation of well capture zones under uncertainty », *Groundwater*, 56: 366-376. doi:[10.1111/gwat.12644](https://doi.org/10.1111/gwat.12644), 2018.
- FRIND, E.O., J.W. MOLSON, M.R. SOUSA et P.J. MARTIN, « Insights from four decades of model development on the Waterloo Moraine: A review », *Canadian Water Resources J.* (Special Issue: The Waterloo Moraine, E. Frind, ed.), 149-166, <http://dx.doi.org/10.1080/07011784.2014.914799>, 2014.
- GREER, K., J. MOLSON, J. BARKER, N. THOMSON et R. DONALDSON, « High pressure injection of dissolved oxygen for hydrocarbon remediation in a fractured dolostone aquifer », *Journal of Contaminant Hydrology*, doi: [10.1016/j.jconhyd.2010.07.007](https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2010.07.007), 2010.
- HILL, M.C., « The practical use of simplicity in developing ground water models », *Groundwater*, 44: 775-781. doi:[10.1111/j.1745-6584.2006.00227.x](https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2006.00227.x), 2006.
- HUNT, R.J., « Applied uncertainty », *Groundwater*, 55: 771-772. doi:[10.1111/gwat.12604](https://doi.org/10.1111/gwat.12604), 2017.
- JANOS, D., J. MOLSON, et R. Lefebvre, Regional groundwater flow dynamics and residence times in Chaudière-Appalaches, Québec, Canada: Insights from numerical simulations, *Can. Water Resour. J.*, Special Issue: Quebec PACES Projects, <https://doi.org/10.1080/07011784.2018.1437370>, 2018.
- KONIKOW, L.F., « The Secret to Successful Solute-Transport Modeling », *Groundwater*, 49: 144-159. doi:[10.1111/j.1745-6584.2010.00764.x](https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2010.00764.x), 2011.
- KONIKOW, L., et J.D. BREDEHOEFT, « Ground-water models cannot be validated », *Adv. Water Resources*, 15, 75-83, 1992.
- MINISTÈRE DE L'ENVIRONNEMENT ET DE LA LUTTE CONTRE LES CHANGEMENTS CLIMATIQUES, *Détermination des aires de protection des prélèvements d'eau souterraine et des indices de vulnérabilité DRASTIC – Guide technique*, 2019, 86 p., [En ligne], <http://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/souterraines/drastic/guide.pdf>.
- MOLSON, J.W., et E.O. FRIND, « On the use of mean groundwater age, life expectancy and capture probability for defining aquifer vulnerability and time-of-travel zones for source water protection », *J. Contaminant Hydrology*, vol. 127, p. 76-87, doi:[10.1016/j.jconhyd.2011.06.001](https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2011.06.001), 2012.
- MOLSON, J.W., et E.O. FRIND, *FLONET/TR2 User Guide*, A Two-Dimensional Simulator for Groundwater Flownets, Contaminant Transport and Residence Time, Version 5, Université Laval et University of Waterloo, 57 p., 2020.
- MONTCOUDIOL, N., J. MOLSON et J.-M. LEMIEUX, « Numerical modelling in support of a conceptual model for groundwater flow and geochemical evolution in the southern Outaouais Region, Quebec, Canada », *Canadian Water Resources Jour.*, Special Issue on Quebec PACES Projects, <http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/07011784.2017.1323560>, 2017.
- MONTCOUDIOL, N., J. MOLSON, J.-M. LEMIEUX et V. CLOUTIER, « A conceptual model for groundwater flow and geochemical evolution in the southern Outaouais Region, Québec, Canada », *Applied Geochemistry* 58, p. 62-77, <http://dx.doi.org/10.1016/j.apgeochem.2015.03.007>, 2015.
- NEUMAN, S.P., et P.J. WIERENGA, *A comprehensive strategy of hydrogeologic modeling and uncertainty analysis for nuclear facilities and sites*, <https://www.nrc.gov/docs/ML0324/ML032470827.pdf>, NUREG/CR-6805, 236 p., 2003.
- NORDSTROM, K., « Models, validation, and applied geochemistry: Issues in science, communication, and philosophy », *Appl. Geochem.*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.apgeochem.2012.07.007>, 2012.

- ORESQUES, N., « Model validation concepts and their application to lead models – Evaluation (not validation) of quantitative models », *Environmental Health Perspectives. Supplements*, vol. 106, n° 6, 1998.
- ORESQUES, N., et K. BELITZ, « Philosophical issues in model assessment », dans Anderson et Bates (ed.), *Model Validation: Perspectives in Hydrogeological Sciences*, John Wiley & Sons, 2001.
- RASSMUSSEN, H., A. ROULEAU et S. CHEVALIER (éditeurs scientifiques), *Outils de détermination d'aires d'alimentation et de protection de captages d'eau souterraine*, document diffusé par le ministère du Développement durable, de l'Environnement et des Parcs du Québec, 2006, 311 p., [En ligne], <http://www.mddep.gouv.qc.ca/eau/souterraines/alim-protec/outils.pdf> (page consultée le 28/07/2020).
- RAYNAULD, M., M. PEEL, R. LEFEBVRE, H. CROW, J. MOLSON, J. AHAD, et E. GLOAGUEN, Caractérisation hydrogéologique du secteur Haldimand, Travaux réalisés pour le Ministère du Développement durable, de l'Environnement, de la Faune et des Parcs du Québec, [Rapport de recherche R-1497](#), 2014.
- REFSGAARD, J.C., et H.J. HENRIKSEN, « Modelling guidelines: terminology and guiding principles », *Advances in Water Resources*, 27, 71-82, 2004.
- REILLY, T.E., et A.W. HARBAUGH, *Guidelines for evaluating ground-water flow models: U.S. Geological Survey Scientific Investigations Report 2004-5038*, 30 p., 2004.
- SCHULZE-MAKUCH, D., « Longitudinal dispersivity data and implications for scaling behavior », *Ground Water*, vol. 43, n° 3, p. 443-456, 2005.
- TÓTH, J., *Gravitational Systems of Groundwater Flow*, Cambridge Press, 2009.
- United States Environmental Protection Agency (EPA), *Assessment framework for groundwater model applications, Solid waste and emergency response*, OSWER, EPA 500-8-94-003, 46 p., 1994.
- United States Geological Survey (USGS), *Online guide to MODFLOW*, 2016, [En ligne], <http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/modflow2000/MFDOC/index.html> (page consultée le 28/07/2020).
- United States Geological Survey (USGS), Advisory Committee on Water Information, 7 octobre 2008. Adresse URL: <http://acwi.gov/>, 2008.
- VOSS, C.I., « Editor's message: Groundwater modeling fantasies – Part 1, adrift in the details », *Hydrogeology Journal*, DOI 10.1007/s10040-011-0790-6, 2011a.
- VOSS, C.I., « Editor's message: Groundwater modeling fantasies – Part 2, down to earth », *Hydrogeology Journal*, DOI 10.1007/s10040-011-0790-6, 2011b.
- ZHENG, C., et G.D. BENNETT, *Applied Contaminant Transport Modeling*, Second Edition, Wiley Interscience, 621 p., 2002.

ANNEXE 1 : STRUCTURE SUGGÉRÉE POUR UN RAPPORT DE MODÉLISATION HYDROGÉOLOGIQUE

1. Résumé
2. Introduction
 - 2.1 Mise en contexte
 - 2.2 Définition et localisation du site
 - 2.3 Objectifs de la modélisation et cadre réglementaire
3. Hydrogéologie du site et modèle conceptuel
 - 3.1 Données de terrain, données du laboratoire
 - 3.2 Interprétation hydrogéologique
 - 3.3 Processus physiques et chimiques pertinents
 - 3.4 Modèle conceptuel
4. Modèle mathématique choisi
5. Modèle du site
 - 5.1 Étendue, structure hydrogéologique
 - 5.2 Maillage, conditions limites et initiales
 - 5.3 Paramètres (physiques et chimiques)
 - 5.4 Paramètres numériques
 - 5.4.1 Critères de précision et stabilité, pas de temps
 - 5.4.2 Paramètres et options choisies du modèle
6. Calibration du modèle
 - 6.1 Stratégie, méthodologie
 - 6.2 Résultats, erreurs de calibration et discussion
7. Simulations et comparaisons des scénarios prédictifs
8. Analyse d'incertitude et de sensibilité
9. Discussion des résultats et des limitations du modèle
10. Conclusions et recommandations
11. Références
12. Annexes
(figures, tableaux, calculs, protocoles, archivage)

ANNEXE 2 : LISTE DE VÉRIFICATION DU CONTENU D'UN RAPPORT DE MODÉLISATION HYDROGÉOLOGIQUE

La liste sommaire suivante mentionne l'information et les données qu'il faut inclure dans un rapport de modélisation hydrogéologique, ainsi que le format de présentation recommandé.

La mise en contexte et les objectifs du projet	<input type="checkbox"/>
Modèle conceptuel :	
Données (ex. : h, Ss, q, K, θ , v, C, T, R, α , λ , D*) : Valeurs (+ unités), localisation (x,y,z) des mesures, dates des mesures, méthodes de terrain et de laboratoire utilisées (protocoles), échelle (volume) des mesures, erreurs et incertitudes, références (sources de données)	<input type="checkbox"/>
Traitement des données : Méthode d'interpolation, calculs explicatifs, cartes de distribution, isocontours des paramètres (piézométrie, hydrostratigraphie) Points de contrôle (points de mesures) superposés en espace	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
Figures : Vue en plan, vue en coupe et vue en 3D du modèle conceptuel, hydrostratigraphie, limites physiques, directions d'écoulement (flèches), échelles (+ exagération verticale) Graphiques des données transitoires (ex. : précipitations, hydrographes, charges ou concentrations aux points observés, température)	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
Hypothèses, limitations, justification du modèle conceptuel	<input type="checkbox"/>
Modèle mathématique :	
Identification, équations gouvernantes et méthodologie (écoulement, traçage de particules, transport), dimensionnalité, processus physiques et chimiques inclus Paramètres du logiciel (ex. : choix du solveur, pondération, couplage, etc.) Hypothèses et limitations	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
Paramètres physiques/chimiques (tableaux et cartes) : Valeurs calibrées ou références de littérature	<input type="checkbox"/>
Conditions limites et initiales (écoulement et transport), cartes détaillées et annotées Sources/pertes (ex. : puits de pompage/injection – localisation, taux)	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
Discrétisation (dans l'espace : maillage 2D ou 3D, et dans le temps), justification Critères de stabilité/précision (nombres de Peclet et de Courant)	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
Résultats :	
Calibration : Stratégie, paramètres variables avec la plage de valeurs justifiée Graphique des charges/débits/concentrations observés (x) vs simulés (y), limites $\pm 1\sigma$ Graphique des erreurs de calibration : vue en plan, vue en coupe Statistiques des erreurs : erreur absolue (EA), erreur absolue moyenne (EAM), écart-type (σ) Bilan de flux, bilan de masse	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>

Discussion	<input type="checkbox"/>
Équipotentiels, vecteurs de vitesse, lignes d'écoulement (ex. : traçage de particules)	<input type="checkbox"/>
Vues en plan pour la nappe et les aquifères ciblés, et en coupes 2D selon la dimensionnalité	<input type="checkbox"/>
Échelles, légendes, annotation	<input type="checkbox"/>
Aires de captage : transitoire, étendue maximale en profondeur; vue en plan et, au besoin, étendue à la surface; enveloppe des traçages, temps identifiés, carte de référence annotée	<input type="checkbox"/>
Panaches : isocontours 2D en espace; vues en plan (concentrations maximales ou concentrations en tranches) ou coupes 2D le long d'une ligne d'écoulement et aux temps d'intérêts, échelles, légendes	<input type="checkbox"/>
Scénarios : définition et justification des objectifs et conditions (tableaux et références), isocontours, échelles, légendes	<input type="checkbox"/>
Analyse de sensibilité :	
Approche (ex. : modèle inverse PEST), plage de valeurs, résultats des simulations	<input type="checkbox"/>
Stratégie de tenir en compte l'incertitude. Ex. : Monte Carlo, fonctions de distribution, dispersion, cas pires, etc.	<input type="checkbox"/>
Discussion :	
Justification du modèle, interprétation des résultats, sources d'erreurs et d'incertitudes	<input type="checkbox"/>
Lacunes (données observées, processus simulés, incertitude)	<input type="checkbox"/>
Recommandations :	
Collecte de données manquantes, préciser les paramètres sensibles	<input type="checkbox"/>
Tester d'autres modèles conceptuels, d'autres scénarios	<input type="checkbox"/>
Comment améliorer le modèle conceptuel et analytique/numérique	<input type="checkbox"/>

Questions à adresser :

Le modélisateur devrait poser les questions suivantes (d'après Barnett et collab. (2012)) :

1. Est-ce que les objectifs de modélisation sont clairement définis?
2. Est-ce que les objectifs sont atteints?
3. Est-ce que le modèle conceptuel est cohérent avec les objectifs?
4. Est-ce que le modèle conceptuel est basé sur toutes les données disponibles, clairement présenté et révisé par un réviseur externe?
5. Est-ce que le design du modèle est conforme aux meilleures pratiques?
6. Est-ce que la calibration est adéquate?
7. Est-ce que les paramètres et les flux calés sont plausibles?
8. Est-ce que la formulation des prédictions du modèle est conforme aux meilleures pratiques?
9. Est-ce que l'incertitude des prédictions est documentée?
10. Est-ce que le modèle est adapté aux objectifs?

ANNEXE 3 : CONDITIONS LIMITES : RÉVISION ET ERREURS À ÉVITER

Les conditions limites et leurs variations dans l'espace et dans le temps doivent être décrites et justifiées dans le rapport, typiquement en images, vues en coupe et en plan et, au besoin, avec des perspectives 3D. Certaines erreurs typiques devraient être évitées et corrigées.

Révision :

Type 1 (Dirichlet) L'inconnu est imposé sur la limite; par exemple, pour l'écoulement, la charge hydraulique est imposée à un ruisseau ou un lac, ou à une limite artificielle loin du site pour réduire l'effet imposé sur le système. Pour un système de transport, ce type peut représenter la concentration d'un contaminant imposée dans une zone source, ou une concentration (ex. : nulle) imposée à une limite en amont de la source. Ces valeurs peuvent varier dans le temps, mais elles sont toujours connues.

Type 2 (Neumann) Le gradient de l'inconnu est imposé; par exemple, pour l'écoulement il s'agit du gradient hydraulique, pour le transport de masse, c'est le gradient de concentration.

Dans le contexte de l'écoulement, normalement cette condition prend la forme d'un flux, par exemple le taux de recharge à la surface (parce que le flux est directement lié avec le gradient hydraulique), ou un flux nul à une limite imperméable ou symétrique.

Dans le contexte du transport de masse, ce type prend normalement la forme d'un gradient nul, qui s'applique le long d'une limite imperméable ou symétrique (où le flux de masse est nul), sur une limite ouverte en amont très loin du site, ou sur une limite de sortie où la concentration n'est pas connue et qui peut varier dans le temps. Dans ce dernier cas, cette condition impose un flux de masse dispersif nul, mais permet toujours un flux de masse advectif si le flux de Darcy à travers la limite n'est pas nul.

Type 3 (Cauchy) Une condition mixte, qui représente un flux d'eau (ou de masse) qui dépend d'une charge (ou concentration) connue et d'un gradient calculé par le modèle qui dépend aussi de cette charge ou concentration connue.

Dans le contexte de l'écoulement, ce type est souvent appliqué pour représenter une limite entre l'eau souterraine et l'eau de surface, où le flux dépend d'une charge connue et d'un gradient variable à travers une couche semi-perméable (ex. : voir Anderson et collab., 2015).

Dans le contexte du transport de masse, dans une zone source (par exemple à la nappe), ce type représente un bilan de masse qui dépend d'un flux advectif à l'extérieur du domaine et d'un flux advectif-dispersif à l'intérieur du domaine. Le flux dispersif dépend d'un gradient de concentration qui est mis à jour par le modèle selon la concentration à la limite calculée à chaque pas de temps.

Erreurs à éviter dans les conditions limites

1. Des limites artificielles trop proches du site d'intérêt. Les limites artificielles devraient être cohérentes avec le modèle conceptuel et ne devraient pas avoir un effet anormal sur le comportement du système. Par exemple, une limite trop proche d'une zone source peut avoir un effet non physique sur le comportement du panache. Il faut vérifier que, près des limites, il n'y a pas d'effet bizarre, comme une déviation locale des lignes d'écoulement ou du panache. Il faut éviter de choisir les limites géopolitiques (ex. : limites municipales, routes, etc.) comme limites du modèle.

Dans l'exemple ci-dessous (fig. A3.1), qui montre une simulation d'un système d'écoulement et les aires de captage pour des puits à un site industriel, on peut constater que les limites sont i) artificielles et ii) trop proches des puits. L'effet est clair : les lignes d'écoulement sont forcées à suivre les limites parallèles à la direction d'écoulement et à intersecter perpendiculairement aux limites de charges constantes.

La solution est de mettre les limites plus loin du site, suivant des limites physiques si possible.

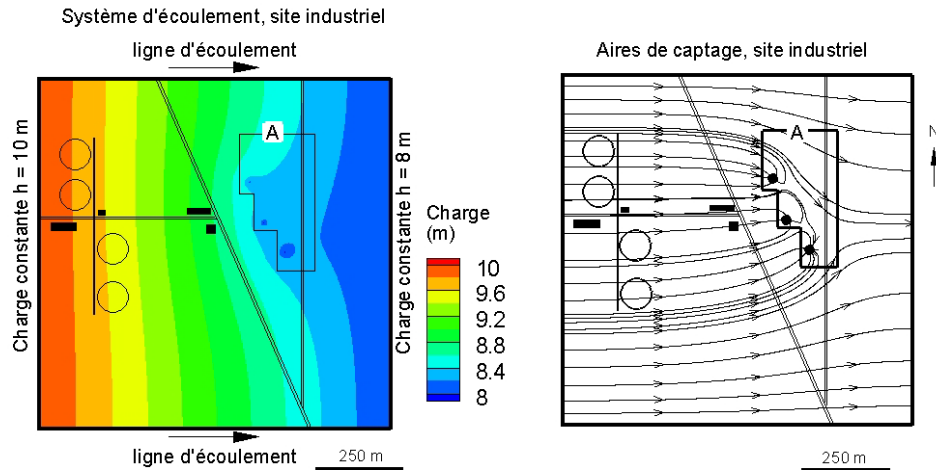


Fig. A3.1 Système d'écoulement : exemple de limites trop proches.

Un autre exemple est montré ci-dessous (fig. A3.2) dans le contexte du transport de masse où les limites horizontales sont trop proches de la zone source et du panache.

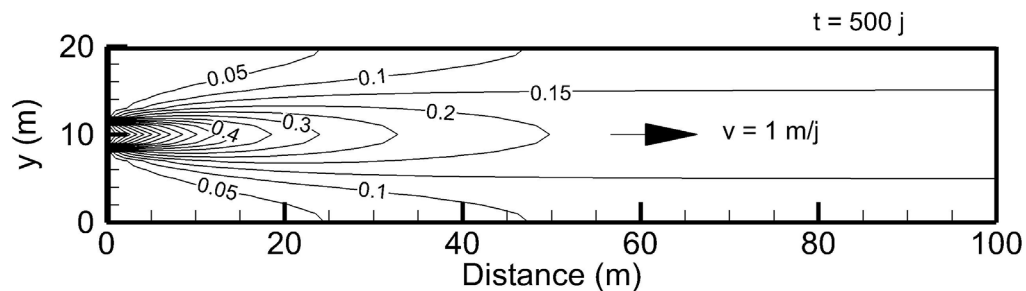


Fig. A3.2 Système de transport de masse : exemple de limites trop proches.

- Des limites artificielles non réalistes. Les limites devraient correspondre aux limites physiques autant que possible, par exemple un ruisseau, un lac, une côte, une couche d'argile ou roc imperméable (d'au moins 2 ordres de grandeur moins perméable que l'unité voisine), ou une frontière d'un bassin versant. Dans certains cas, d'autres limites peuvent suivre une limite symétrique, une ligne d'écoulement ou une équipotentielle. S'il n'y a pas de limites physiques, la limite devrait être assez loin du site d'intérêt local. L'emplacement de ces limites et leurs valeurs doivent être justifiés.
- Dans un système d'écoulement, trop de limites de type 1 (charges imposées). Trop de nœuds de type 1 va imposer trop de contrôle sur le système et peut générer des résultats irréalistes. Avec trop de nœuds imposés, la calibration des charges hydrauliques risque d'être toujours précise sans tenir compte des autres paramètres d'écoulement, ce qui peut générer des vitesses et des flux irréalistes.

Un problème typique qui y est relié se produit quand une charge hydraulique est imposée à une limite (par exemple à la nappe), sans avoir vérifié les flux simulés à travers cette charge et dans le domaine. Le flux calculé à travers une nappe à charge imposée, par exemple, va dépendre de la conductivité hydraulique et les variations des charges le long de la nappe (c'est-à-dire les gradients). Cependant, ce flux (la recharge, dans ce cas) doit tomber dans une plage de valeurs réaliste selon les conditions météorologiques et du terrain.

Un exemple est montré ci-dessous (fig. A3.3), où dans les deux cas la nappe (une limite du modèle) a été imposée avec des charges de type 1 (Dirichlet), basées par exemple sur les charges observées. La base est imperméable et les deux limites verticales sont des limites symétriques (gradient nul) pour l'écoulement. La seule différence entre les deux modèles conceptuels est la conductivité hydraulique : dans le cas à gauche $K = 10^{-5}$ m/s et à droite, $K = 10^{-6}$ m/s. À cause des charges identiques imposées à la limite dans les deux cas, les charges hydrauliques simulées (lignes pointées) sont également identiques et semblent réalistes. Cependant, à cause de la différence de K , les vitesses sont 10 fois plus élevées dans le cas à gauche. Le taux de recharge sera aussi 10 fois plus élevé que celui à droite, qui est montré par les vecteurs de vitesse. Dans ce cas, une calibration du système d'écoulement basée seulement sur les charges hydrauliques pourrait être bien irréaliste.

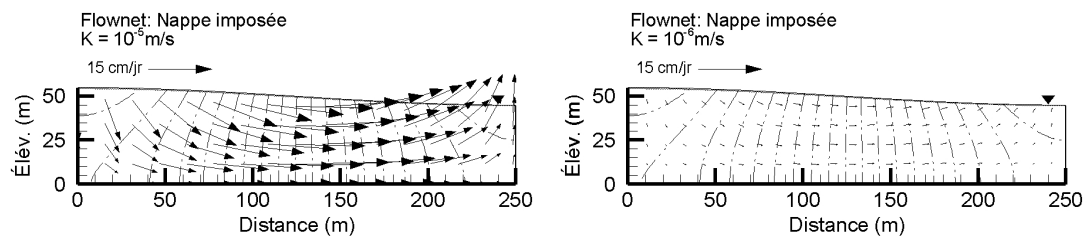


Fig. A3.3 Système d'écoulement qui montre l'effet des charges imposées sur la nappe.

La forme de la nappe devrait normalement être libre (condition de type 2, Neumann) avec un taux de recharge imposé à la surface, et la conductivité hydraulique (K) devrait être calibrée. La forme de la nappe (et la zone non saturée au besoin) devrait être calculée par le modèle.

- Un puits de pompage trop proche d'une limite dans un système d'écoulement. Dans un cas réel, un tel puits peut changer la charge ou le flux dans la région voisine. Un puits de pompage à côté d'une limite à charge constante, par exemple, n'aura aucun effet sur la charge le long de cette limite, donc il n'y aura pas de rabattement, ce qui n'est pas réaliste si cette limite ne représente pas une source d'eau effectivement infinie, comme un grand lac ou une grande rivière, par exemple.

De la même façon, un puits trop proche d'une limite de symétrie, qui représente la limite d'un bassin versant, va induire trop de rabattement parce qu'il n'y a pas de source d'eau à travers la limite qui est immobile. Dans le cas réel, la limite du bassin va se déplacer vers l'autre bassin pour trouver assez d'eau pour alimenter le puits.

5. Dans un système de transport, une condition de type 2 (gradient nul) à côté d'une zone source de type 1), qui va avoir un effet de dispersion artificielle autour de la zone source. Une condition de type 3 est le meilleur choix pour une zone source et autour de la zone source. L'exemple ci-dessous (fig. A3.4) montre l'erreur avec un gradient nul à côté d'une zone source, le résultat et trop de dispersion. Par contre, un type 1 pour une zone source (concentration imposée $C_0 > 0$) et à l'extérieur de la source (où $C_0 = 0$) va limiter la dispersion et n'est pas recommandé.

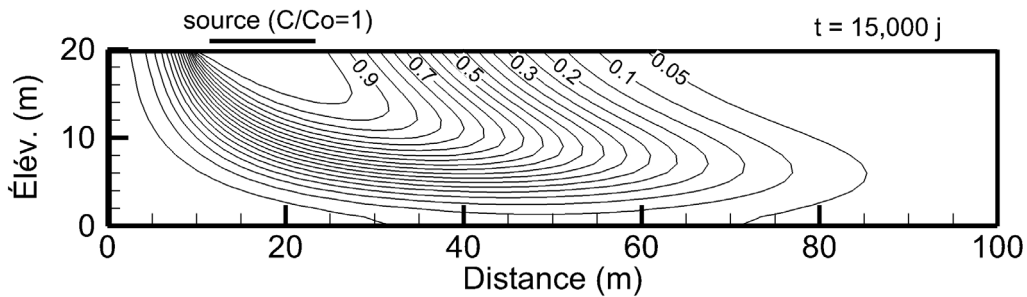


Fig. A3.4 Un panache simulé qui montre l'effet d'une limite gradient nul à proximité d'une zone source. Dans ce cas, le gradient nul à droite (en aval) de la source va imposer un flux de masse artificiel.

6. Dans un système de transport, des dispersivités trop grandes par rapport à l'échelle du système. L'exemple ci-dessous (fig. A3.5) montre un panache en coupe 2D, qui a été simulé avec une dispersivité transversale verticale (α_{TV}) trop élevée (dans ce cas, $\alpha_L = 10$ m, $\alpha_{TV} = 1.0$ m). Le résultat est trop de dispersion du panache, et les isocontours touchent la limite inférieure qui n'est pas réaliste.

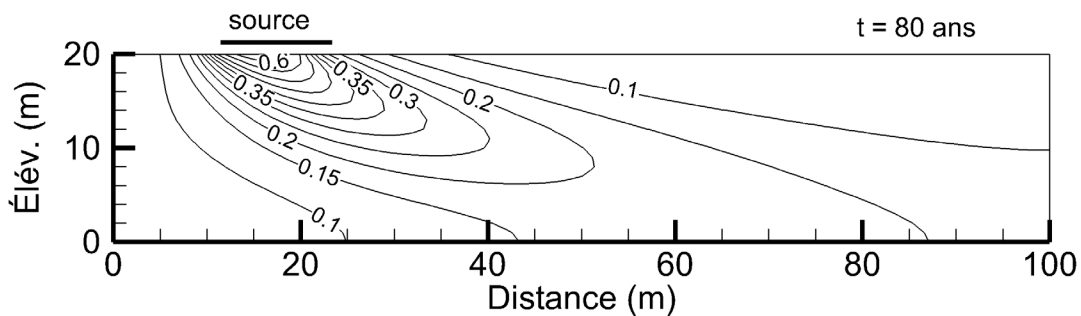


Fig. A3.5 Un panache simulé avec une dispersivité verticale trop grande par rapport à l'échelle du système. La dispersion du panache est donc trop élevée dans le sens vertical.

ANNEXE 4 : CRITÈRES DE PRÉCISION

Un rapport de modélisation doit montrer que les simulations sont fiables et que les erreurs numériques sont acceptables. Les critères les plus importants pour vérifier la précision d'un modèle numérique et pour minimiser les erreurs numériques sont le bilan de masse (ou de l'énergie) et les nombres de Peclet et de Courant (ex. : Anderson et collab., 2015). Ces critères sont parmi les plus importants, mais ils sont souvent négligés ou mal définis dans la description d'un modèle de site.

Le bilan de masse s'applique pour les flux d'eau dans un modèle d'écoulement ainsi que pour la masse des espèces dans un modèle de transport de masse, ainsi que pour l'énergie dans un modèle de transfert de chaleur. Ce bilan, ou erreur ε (ex. : en kg/s), s'exprime en général par :

$$\varepsilon = J_{in} - J_{out} + \Delta M$$

où J_{in} et J_{out} sont les flux de masse (de l'eau ou d'un contaminant) à l'entrée et à la sortie du modèle (c'est-à-dire à travers les limites) et ΔM est le taux de changement de masse dans le domaine (ex. : dû aux réactions ou pompage, etc.). Ce bilan sera souvent présenté sous forme de pourcentage par rapport à une masse (ou flux) de référence et avec l'erreur cumulative (intégrée) dans le temps. Le bilan devrait être enregistré dans le temps par tous les modèles; un bilan cumulatif de $\pm 10\%$ est normalement acceptable. Il faut prendre en note qu'avec certains modèles (ex. : en éléments finis) de grandes erreurs locales positives et négatives pourraient s'annuler, tandis que le bilan global pourrait paraître acceptable. Ce bilan devrait être noté dans un rapport de modélisation avec une discussion sur l'importance de l'erreur.

Le nombre de Peclet contrôle la dispersion numérique et peut être utilisé pour déterminer la discrétisation en espace. Le nombre de Courant contrôle la stabilité d'une solution et la discrétisation dans le temps.

Les nombres de Peclet et de Courant sont définis par les équations suivantes :

$$Pe = \frac{v\Delta x}{D} \leq 2; \quad \text{si la diffusion est faible, on a: } Pe = \frac{\Delta x}{\alpha_L} \leq 2; \quad \text{ou: } \Delta x \leq \alpha_L$$

$$Cr = \frac{v\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{Pe}{2}; \quad \text{si } Pe=2, \text{ on a: } \frac{v\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \text{ ou: } \Delta t \leq \frac{\Delta x}{v}$$

où Δx est la discrétisation en espace (x, y, z) (m), Δt est le pas de temps (s), v est la vitesse d'eau souterraine (m/s) et D est le coefficient de dispersion hydrodynamique (m^2/s) (noter qu'on utilise v/R et D/R dans le cas avec un facteur de retard R). Les dépassements du nombre de Peclet sont souvent visibles par une augmentation de la dispersion (dispersion numérique), tandis que les dépassements du nombre de Courant sont souvent visibles par des oscillations de concentrations, c'est-à-dire des concentrations négatives ou plus importantes que la concentration maximale imposée sur une limite ou comme condition initiale, ou bien par des problèmes de stabilité numérique ou de convergence.

Ces critères devraient être montrés dans un graphique des isocontours, où les valeurs minimales et maximales avec des calculs représentatifs pourraient figurer dans le texte ou dans un tableau.

Dans certains cas, des dépassements sont acceptables. Si ces critères sont dépassés dans quelques régions critiques du maillage ou pendant certaines périodes, il faut indiquer ces dépassements et montrer qu'ils n'ont pas d'effets importants sur les calculs (ex. : il faut montrer que le bilan de masse reste toujours acceptable et qu'il n'y a pas de comportement inattendu dans ces régions).

ANNEXE 5 : DESCRIPTION SOMMAIRE DES MODÈLES NUMÉRIQUES

Modèle	Description
MODFLOW	Un modèle d'écoulement en 3D de l'USGS qui utilise la méthode de différences finies. Plusieurs « modules » sont disponibles pour simuler l'écoulement de surface, l'écoulement à densité variable, etc. Gratuit, mais plusieurs interfaces commerciales sont aussi disponibles. https://www.usgs.gov/mission-areas/water-resources/science/modflow-and-related-programs?qt-science_center_objects=0#qt-science_center_objects
MT3DMS	Un modèle de transport réactif 3D qui pourrait être couplé avec MODFLOW. https://www.usgs.gov/software/mt3d-usgs-groundwater-solute-transport-simulator-modflow
FEFLOW	Un modèle d'écoulement et transport 3D qui utilise la méthode d'éléments finis. L'interface est très puissante et peut générer des maillages complexes. Le module PEST peut faciliter la calibration inverse. Peut simuler l'écoulement à densité variable, fractures discrètes, écoulement de surface, etc. https://www.mikepoweredbydhi.com/products/feflow
HYDROGEOSPHERE	Modèle d'écoulement et transport 3D qui utilise la méthode de volume de contrôle – éléments finis. Idéal pour simuler les bassins versants avec l'eau de surface, fractures discrètes, etc. https://www.aquanty.com/hydrogeosphere
SEEPW/CTRANW	Modèle commercial d'écoulement et transport 2D, dans des domaines saturés et non saturés. Développé pour le domaine géotechnique, https://www.geoslope.com/products/seep-w
SUTRA	Modèle de l'USGS pour simuler l'écoulement et transport 2D, dans des domaines saturés et non saturés. https://www.usgs.gov/software/sutra-a-model-2d-or-3d-saturated-unsaturated-variable-density-ground-water-flow-solute-or
FLONET	Un modèle 2D d'écoulement saturé en régime permanent. Utile pour simuler les flownets qui montrent les équipotentielles et lignes de courant. john.molson@ggl.ulaval.ca. https://www.centreau.ulaval.ca/en/members/molson-john/

Une liste des modèles de l'USGS est disponible sur le site :
<https://www.usgs.gov/products/software/water>.

ANNEXE 6 : DÉFINITIONS DES SYMBOLES

<u>Symbole</u>	<u>Définition et unités S.I.</u>
h	charge hydraulique (m)
∇h	gradient hydraulique (-)
q	flux de Darcy (m/s)
v	vitesse linéaire de l'écoulement (m/s)
Kx,Ky,Kz	conductivité hydraulique (m/s)
k	perméabilité intrinsèque (m ²)
θ	porosité (-)
C	concentration (kg/m ³)
$\alpha_L, \alpha_{TH}, \alpha_{TV}$	dispersivités (m) (longitudinale, transverse horizontale, transverse verticale)
D	coefficient de dispersion hydrodynamique (m ² /s)
D*	coefficient de diffusion moléculaire (m ² /s)
R	facteur de retard (-)
K _d	coefficient de distribution (m ³ /kg)
λ	taux de dégradation (s ⁻¹)
ρ	masse volumique (kg/m ³)
T	température (°C)
S _s	coefficient d'emmagasinement spécifique (m ⁻¹)
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	discrétisation en espace (m)
Δt	discrétisation en temps (s)
μ, σ	moyenne, écart-type
x, y	coordonnées horizontales (m)
z	coordonnées d'élévation (ex. : interfaces hydrostratigraphiques, topographie)
EA	Erreur absolue (fig. 4)
EAM	Erreur absolue moyenne (fig. 4)
RMSE	Erreur quadratique (fig. 4)

*Environnement
et Lutte contre
les changements
climatiques*

Québec 