Quantification des incertitudes d'une exploitation d'un gisement d'uranium par Récupération In Situ

Jean Langanay

▶ **To cite this version:**

Jean Langanay. Quantification des incertitudes d'une exploitation d'un gisement d'uranium par Récupération In Situ. Ingénierie de l'environnement. Université Paris sciences et lettres, 2021. Français. NNT : 2021UPSLM035 . tel-03520381

HAL Id: tel-03520381
https://pastel.hal.science/tel-03520381

Submitted on 11 Jan 2022

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

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

PSL UNIVERSITÉ PARIS

THÈSE DE DOCTORAT

DE L'UNIVERSITÉ PSL

Préparée à Mines ParisTech

Quantification d'incertitudes de production d'uranium d'une exploitation par Lixiviation In Situ

Soutenue par

Jean Langanay

Le 25 mars 2021

École doctorale n°398

Géosciences Ressources Naturelles et Environnement

Spécialité

Géosciences et Géoingéniérie

Composition du jury :

Lionel MERCURY Pr, Université d'Orléans	*Président*
Jean-Raynald de DREUZY Directeur de Recherche CNRS, Université de Rennes 1	*Rapporteur*
Philippe RENARD Pr, University of Neuchâtel	*Rapporteur*
Mickaële LE RAVALEC Dr, IFPEN	*Examinatrice*
Pauline COLLON Dr, Université de Lorraine	*Examinatrice*
Valérie LANGLAIS Dr, Orano	*Examinatrice*
Thomas ROMARY Dr, Mines ParisTech	*Co-directeur de thèse*
Vincent LAGNEAU Pr, Mines ParisTech	*Directeur de thèse*

MINES ParisTech | PSL

Table des matières

I Contexte scientifique et industriel **14**

1 Présentation générale de l'ISR **15**
1.1 L'exploitation par ISR . . . 15
1.1.1 Principe général . . . 15
1.1.2 Les gisements de type roll-front uranifères . . . 15
1.1.3 Conditions de viabilité de l'ISR . . . 17
1.1.4 Processus chimique de l'ISR acide . . . 17
1.2 Description du gisement exploité par Katco . . . 18
1.2.1 Géographie et géologie . . . 18
1.2.2 Minéralogie . . . 18
1.2.3 Hydrogéologie . . . 19
1.3 Variabilité spatiale des propriétés géologiques du roll-front . . . 19

2 Géomodélisation du gisement **20**
2.1 Objectif de la modélisation géologique . . . 20
2.2 Données utilisées pour la géomodélisation . . . 20
2.2.1 Mesures des propriétés du gisement . . . 20
2.2.2 Synthèse des mesures de la géologie . . . 22
2.3 Modélisation déterministe de la géologie . . . 22
2.4 Modélisation stochastique . . . 25
2.4.1 Faciès Oxydé-Minéralisé-Réduit . . . 25
2.4.2 Modélisation du lithotype lithologique par pluri-gaussiennes . . . 27
2.4.3 Modélisation de la teneur . . . 28
2.4.4 Association des simulations du faciès OMR, du lithotype et de la teneur . . . 29
2.5 Conclusion de la géomodélisation . . . 30

3 Modélisation de l'ISR par transport réactif **32**
3.1 Introduction au transport réactif . . . 32
3.2 Notions de base du transport réactif . . . 33
3.2.1 Processus d'écoulement . . . 33
3.2.2 Processus de transport . . . 34
3.2.3 Processus de spéciation chimique . . . 34
3.2.4 Couplage pour la modélisation par transport réactif . . . 35
3.3 Application d'un code de transport réactif à l'ISR . . . 36
3.3.1 Intérêt de la modélisation de l'ISR par transport réactif . . . 36
3.3.2 Modèle géologique . . . 36
3.3.3 Modèle hydrodynamique . . . 36
3.3.4 Modèle géochimique . . . 37

4 Propagation de l'incertitude géologique **39**
4.1 Propagation directe de l'incertitude . . . 39
4.2 Propagation parcimonieuse de l'incertitude géologique . . . 40
4.2.1 Description des réalisations . . . 40

4.2.2 Calcul de distance entre les réalisations . . . 41
4.2.3 Clustering, sélection et pondération des réalisations . . . 42
4.2.4 Quantification des incertitudes . . . 43

II Quantification d'incertitude à l'aide de proxys numériques 46

5 Propagation directe d'incertitude en ISR 49
5.1 Modélisation du roll front dans deux blocs de production . . . 49
5.1.1 Présentation du bloc de production PB01 . . . 49
5.1.2 Présentation du bloc de production PB02 . . . 51
5.1.3 Comparaison des deux blocs . . . 54
5.2 Présentation des simulations de l'ISR de PB01 et PB02 . . . 55
5.2.1 Hypothèses paramétriques des simulations de l'ISR . . . 55
5.2.2 Simulations de l'ISR et variabilité des résultats . . . 58
5.2.3 Conclusion de la propagation directe de l'incertitude à partir de réalisations conditionnées ED . . . 64
5.3 Propagation directe avec conditionnement aux puits technologiques . . . 64
5.4 Conclusion de la propagation directe de l'incertitude . . . 66

6 Les proxys statiques 67
6.1 Principes et intérêts du calcul de quantités sur les réalisations . . . 67
6.1.1 Intérêts, avantages, et volonté derrière les descripteurs statiques . . . 67
6.1.2 Caractérisation de grandeurs dans chaque réalisation . . . 67
6.2 Combinaison de descripteurs et nombre de médoïdes . . . 68
6.2.1 Utilisation d'une distance de référence . . . 69
6.2.2 Application de la réduction de scénarios sur le bloc PB01 . . . 69
6.2.3 Transposition de la combinaison de descripteurs sur le bloc PB02 . . . 74
6.3 Discussion des limites des descripteurs statiques . . . 77

7 Proxys basés sur le transport et la récupération de traceurs en solution 78
7.1 Description du proxy . . . 78
7.1.1 Objectif : prise en compte du comportement hydrodynamique des réalisations 78
7.1.2 Répartition des traceurs utilisés . . . 78
7.1.3 Simulations de transport et de récupération de traceurs dans PB01 et PB02 . 79
7.2 Combinaisons de descripteurs pour la réduction de scénarios . . . 81
7.2.1 Présentation de différentes combinaisons de descripteurs . . . 81
7.2.2 Obtention d'une combinaison efficace . . . 83
7.3 Résultats de réduction de scénarios . . . 84
7.3.1 Réduction de scénarios sur PB01 . . . 84
7.3.2 Validation sur PB02 . . . 87
7.4 Conclusion sur l'utilisation conjointe de proxys statiques et d'un proxy de récupération de traceurs . . . 90

8 Proxys basés sur la dissolution, le transport et la récupération d'un minéral traceur 91
8.1 Lixiviation d'un traceur minéral . . . 91
8.1.1 Objectifs . . . 91
8.1.2 Lixiviation d'un minéral traceur . . . 91
8.2 Simulations des deux proxys dans PB01 et PB02 . . . 93
8.2.1 Dissolution rapide à l'équilibre du minéral traceur . . . 93
8.2.2 Dissolution avec cinétique du minéral traceur . . . 95
8.2.3 Comparaison des deux proxys . . . 97
8.3 Réduction de scénarios grâce au minéral traceur cinétique . . . 98

8.3.1 Application sur PB01 . . . 98
8.3.2 Validation sur PB02 . . . 101
8.4 Réduction du temps de simulation du proxy . . . 104
8.5 Conclusions . . . 105

9 Impact de l'incertitude de production sur le calcul du plan minier 108
9.1 Planification minière long terme de l'exploitation . . . 108
9.2 Modèle simplifié de propagation de l'incertitude de production . . . 109
9.2.1 Objectif minier . . . 109
9.2.2 Paramètres temporels de contrôle du calcul du plan minier . . . 109
9.2.3 Input de production d'uranium des blocs possibles . . . 110
9.2.4 Résumé du modèle GSM_UQ . . . 110
9.3 Données de production d'uranium . . . 110
9.3.1 Choix des blocs . . . 110
9.3.2 Quantification des incertitudes de production des blocs par réduction de scénarios 110
9.3.3 Utilisation des courbes . . . 111
9.4 Applications . . . 113
9.4.1 Calcul du plan minier à dates d'ouverture et de fermeture libres . . . 113
9.4.2 Calcul du plan minier à dates d'ouverture et de fermeture fixées . . . 114
9.5 Bilan . . . 116
9.5.1 Conclusion . . . 116
9.5.2 Perspectives . . . 116
9.5.3 Discussion . . . 116

10 Construction de modèles de substitution du code de résolution de la chimie 118
10.1 Contexte de l'étude . . . 118
10.1.1 Présentation de la problématique . . . 118
10.1.2 Travaux et plan du chapitre . . . 119
10.2 Applications . . . 119
10.2.1 Dissolution 1D de calcite . . . 119
10.2.2 ISR-U d'une seule cellule de production . . . 121
10.3 Analyse et conclusion des travaux d'exploration . . . 126
10.3.1 Conclusions . . . 126
10.3.2 Perspectives . . . 126

III Bilan 128

11 Conclusions 129
11.1 Conclusion générale . . . 129
11.2 Extension du domaine de l'incertitude . . . 130
11.2.1 Intégration d'autres sources d'incertitudes . . . 130
11.2.2 Gestion des dépendances et des interactions inter-blocs . . . 131
11.2.3 Amélioration de la méthodologie de construction des réalisations . . . 131
11.3 Conseils à l'exploitant . . . 132

IV Annexe 134

A Article accepté pour publication dans Computational Geosciences 135

Table des figures

1 Schéma d'une exploitation par ISR 9
2 La répartition spatiale hétérogène des propriétés impacte les résultats des simualtions de transport réactif 10

1.1 Schéma de l'exploitation d'un dépôt d'uranium par ISR 16
1.2 Schéma d'un gisement typique de roll-front 16
1.3 Localisation des gisements de Muyunkum et de Tortkuduk 18

2.1 Exemple de répartition des forages sur le champ de puits en fonction des différentes phases de vie du gisement 21
2.2 Exemple de coupe géologique d'un roll-front 23
2.3 Interpolation d'enveloppe minéralisée à partir de coupes géologiques interprétées . . 23
2.4 Comparaison entre le résultat d'un krigeage et de trois simulations 24
2.5 Présentation du principe des simulations gaussiennes tronquées sur le faciès OMR . . 25
2.6 Passage des courbes de proportions verticales à la matrice de proportions 26
2.7 Présentation du principe de la modélisation par pluri-gaussiennes du lithotype 27
2.8 Passage des courbes de proportions verticales à la matrice de proportions 3D 28
2.9 Transformation des mesures de teneurs en données gaussiennes par anamorphose par polynômes d'Hermite 29
2.10 Exemple de coupe verticale d'une réalisation du gisement, constituée d'un triplet de simulations des propriétés lithotype, faciès OMR et teneur en uranium 30

3.1 Schéma de résolution du modèle de transport réactif par le logiciel Hytec 36

4.1 Schéma de propagation directe de l'incertitude géologique en incertitude dynamique . 40
4.2 Variabilité des résultats de simulation d'ISR pour un grand nombre de réalisations . 41
4.3 Exemple de résultat de l'algorithme des k-médoïdes 43
4.4 Exemple de variabilité des résultats de simulation d'ISR pour un petit nombre de réalisations et quantification de l'incertitude des courbes 44

5.1 Carte du champ de puits du bloc de production PB01 50
5.2 Trois coupes géologiques verticales parallèles du bloc de production PB01 présentant la lithologie et la minéralisation 51
5.3 Coupes verticales d'une réalisation du bloc de production PB01 52
5.4 Trois coupes verticales parallèles de PB02 montrant le lithotype et la minéralisation . 52
5.5 Carte du champ de puits du bloc de production PB02 53
5.6 Coupes verticales d'une réalisation du bloc de production PB02 54
5.7 Graphiques des productions cumulées et instantanées d'uranium des cent réalisations de PB01 et PB02 59
5.8 Histogrammes des quatre variables résumant la variabilité de la production d'uranium de PB02 61
5.9 Histogrammes des quatre variables résumant la variabilité de la production d'uranium de PB02 61
5.10 Graphiques des productions cumulées et instantanées d'uranium des cent réalisations de PB01 et PB02 63

5.11 Comparaison de la quantification d'incertitude des simulations ISR-U faites avec les réalisations conditionnées exploration développement et de la quantification d'incertitude des simulations ISR-U calculées avec les réalisations conditionnées exploration développement et technologique sur PB01 65

6.1 Variance cumulée portée par les composantes principales du MDS sur les descripteurs statiques des réalisations du bloc PB01 70
6.2 Silhouettes moyennes des réalisations en fonction du nombre de clusters après le partitionnement des réalisations de PB01 avec les descripteurs statiques 71
6.3 Partitionnement des réalisations en fonction de PB01 avec les descripteurs statiques . 71
6.4 Productions d'uranium cumulées et instantanées des réalisations sélectionnées pour le bloc PB01 avec les descripteurs statiques 72
6.5 Comparaison de la quantification d'incertitude sur la productions d'uranium cumulées et instantanées des réalisations sélectionnées pour le bloc PB01 avec les descripteurs statiques 73
6.6 Variance cumulée portée par les composantes principales du MDS sur les descripteurs statiques des réalisations du bloc PB02 74
6.7 Silhouettes moyennes des réalisations en fonction du nombre de clusters après le partitionnement des réalisations de PB02 avec les descripteurs statiques 75
6.8 Productions d'uranium cumulées et instantanées des réalisations sélectionnées pour le bloc PB02 avec les descripteurs statiques 75
6.9 Comparaison de la quantification d'incertitude sur la production d'uranium cumulée et instantanée des réalisations sélectionnées pour le bloc PB02 avec les descripteurs statiques 76

7.1 Courbes de production instantanée et cumulée du traceur basse teneur dans les cent réalisations de PB01 et PB02 80
7.2 Variance cumulée portée par les composantes principales du MDS sur la combinaison de descripteurs statiques et de récupération de traceurs des réalisations du bloc PB01 85
7.3 Coefficient de silhouette des réalisations en fonction du nombre de clusters après le partitionnement des réalisations de PB01 avec les descripteurs statiques et de récupération de traceurs 85
7.4 Comparaison de la quantification d'incertitude de référence et celle approchée par la réduction de scénarios utilisant les descripteurs statiques et de récupération de traceurs sur PB01 86
7.5 Variance cumulée portée par les composantes principales du MDS sur la combinaison de descripteurs statiques et de récupération de traceurs des réalisations du bloc PB02 87
7.6 Silhouettes moyennes des réalisations en fonction du nombre de clusters après le partitionnement des réalisations de PB02 avec les descripteurs statiques et de traceurs . 87
7.7 Comparaison de la quantification d'incertitude de référence et celle approchée par la réduction de scénarios utilisant les descripteurs statiques et de récupération de traceurs sur PB02 89

8.1 Graphiques des productions cumulées et instantanées du traceur hydro des cent réalisations de PB01 et PB02 94
8.2 Graphiques des productions cumulées et instantanées du traceur cinétique des cent réalisations de PB01 et PB02 96
8.3 Variance cumulée associée aux composantes principales du MDS effectué sur les trois descripteurs retenus 99
8.4 Silhouettes moyennes des réalisations en fonction du nombre de clusters après le partitionnement des réalisations de PB01 avec les descripteurs du minéral traceur cinétique 99
8.5 Comparaison de la quantification d'incertitude de référence et celle approchée par la réduction de scénarios utilisant les descripteurs de la récupération du minéral traceur cinétique sur PB01 100

8.6 Variance cumulée portée par les composantes principales des descripteurs du minéral traceur cinétique sur PB02 101
8.7 Silhouettes moyennes des réalisations en fonction du nombre de clusters après le partitionnement des réalisations de PB02 avec les descripteurs obtenues sur la récupération du minéral traceur cinétique 101
8.8 Comparaison de la quantification d'incertitude de référence et celle approchée par la réduction de scénarios utilisant les descripteurs obtenues sur la récupération du minéral traceur cinétique sur PB02 103
8.9 Corrélation entre les distances de référence et les distances proxys en fonction de la date de fin de simulation des traceurs 104

9.1 Carte des quatre blocs utilisés dans la propagation de l'incertitude de production dans le plan minier 111
9.2 P_{10}, P_{50} et P_{90} approximées des blocs utilisés pour la propagation d'incertitude dans le calcul de la séquence minière 112
9.3 Courbes de production journalière de l'exploitation des plans miniers calculés avec dates libres 114
9.4 Comparaison des productions de la zone dans les cas pessimiste, optimiste et de référence avec les même dates d'ouverture imposées 115

10.1 Premier modèle de transport réactif utilisé pour développer un méta-modèle 119
10.2 Schéma d'un réseau de neurones profonds 123

Remerciements

Ces années de recherche sur la quantification d'incertitude de production en ISR furent pour moi une profonde et enrichissante aventure personnelle et professionnelle. Malgré toutes les conditions sanitaires particulières ayant impacté le monde au cours de l'année 2020 et ce début d'année 2021, ces travaux se terminent par cette soutenance et ses intéressantes discussions.

Je tiens tout d'abord à remercier les membres du jury d'avoir accepté de juger mon travail par visioconférence, et en particulier le Pr. Lionel Mercury d'avoir présidé la soutenance. Je remercie également le Pr. Philippe Renard et le Pr. Jean-Raynald de Dreuzy pour avoir chacun émis un rapport sur mon manuscrit. Merci aux Dr Mickaële Le Ravalec et Pauline Collon d'avoir, non seulement accepté de faire partie de mon jury, mais aussi d'avoir pris de leur temps pour vérifier le bon déroulement de ma thèse au cours des différents comités de suivi. Merci à mon directeur de thèse : Vincent Lagneau pour les riches discussions que nous avons pu entretenir au cours de ces trois années. Merci à Thomas Romary de m'avoir encadré, guidé et de m'avoir initié aux ficelles du monde académique. Enfin, tu as rejoint plus tardivement l'encadrement de la thèse, mais merci à toi, Valérie, pour ton suivi attentif des travaux, tes précieux conseils et pour avoir pertinemment exprimé les enjeux chers à Orano.

La thèse s'inscrit dans le projet de chaire industrielle "ISR-U" entre Orano et Mines ParisTech. Je remercie vivement les différentes personnes que j'ai rencontrées et avec lesquelles j'ai pu travailler lors de mes passages hebdomadaires à la Tour Areva à la défense, puis au Prisme à Châtillon. Je pense notamment à Gwenaële, Tatiana, Kuat, Olivier, et d'autres encore.

Une grande partie de ma thèse s'est déroulée à Fontainebleau, sur le site du Centre de Géosciences. J'y ai fait des rencontres et tissé des liens forts qui, je l'espère, resteront longtemps. Merci à Jean-Louis, Damien, Caroline et Christine de m'avoir laissé me glisser dans votre équipe le temps des enseignements de terrains. Merci Alexandrine, Laurent et Hervé de l'attention que vous portez aux doctorants pour être toujours prêts à les aider dans leur parcours. Merci à Isabelle et Xavier de la confiance que vous accordez aux doctorants pour leur permettre de créer une joyeuse vie au sein du centre.

Je remercie profondément les membres de l'équipe géostatistiques pour leur bonne humeur, leurs discussions et leur soutien. Merci Emilie, Xavier, Lantu, Fabien, Didier, Nicolas, Jacques, Cachou, Nathalie, Gaëlle ... Vous créez une ambiance conviviale et chaleureuse dans laquelle il a été particulièrement agréable de travailler.

Ces années de doctorat m'ont permis de rencontrer de nombreux autres doctorants, post-doctorants et jeunes chercheurs. Toutes ces joyeuses présences à fontainebleau , à Paris, ou à Châtillon furent autant d'occasion de rencontrer des gens formidables qui m'épaulèrent au cours de ces années. Merci à vous Loïc et Alexandre pour ces multiples pauses thés, Kiki et ton audace de garde-contre, JB, bôôté légendaire, Robin, Albane, Eric et toute la team du CMM, Nicolo et ton jeu à l'italienne, Aurélien II, compagnon de philosophie cubique, Bob, organisateur de la fantastique soirée de halloween, Manon, et ta patience de coloc, Maëlle, co-stagiaire et co-thésarde pendant des années, Antoine, qui s'est aventuré jusqu'au Kazakhstan avant de revenir se lancer dans une thèse, Nicolas, pour ton enthousiasme, tes conseils, et pour la plus belle des filleules, Aurélien, le plus adorable des germaniques, Thibaut : bellifontain d'adoption, Angélique, Bibiche, pas fichu d'avoir les trois bouts et de faire le contrat, Paul, pour m'avoir fait confiance en me permettant de reprendre DopaMines, et tous ceux que j'oublierai inévitablement.

Je remercie en particulier les doctorants du géogroupe : Mike, Ricardo, Alan, Luc Hugo, Katherine, Mathieu, et Lucia ! Ce soutien, ces attentions, les tea times, les PFP, ... Je remercie en particulier Laure et mes deux co-bureaux Léa et Marine pour votre présence incomparable et ces profondes amitiés.

Et enfin je remercie tous mes proches, en particulier ma famille, de votre compréhension face à ce défi auquel vous m'avez vu m'atteler, de votre écoute au cours de celle-ci, de votre présence le jour J, et pour votre fierté à la fin. J'en suis fier aussi, mais ce sentiment n'est rien comparé à ma joie de vous compter autour de moi.

Je te remercie Marie de ton écoute, de ton soutien, de ta présence.

Merci à tous pour tout !

Introduction

La lixiviation in-situ, aussi nommée récupération in-situ, ou *In-Situ Recovery* (ISR) en anglais, est devenue la principale technique d'exploitation d'uranium dans le monde au cours des dernières années. La proportion d'uranium exploitée par ISR s'est développée en passant de 13% en 1997 à 50% en 2011. La méthode consiste à lixivier l'uranium directement dans le gisement à l'aide d'une solution minière injectée par des puits injecteurs. La solution modifie les conditions d'oxydo-réduction du gisement et permet le changement de valence de l'uranium (IV) insoluble en uranium (VI) soluble. La solution contenant l'uranium dissous est pompée à l'aide d'un réseau de puits producteurs. Le fluide pompé est ensuite transporté jusqu'à une usine de traitement chimique qui extrait l'uranium dissous. L'ISR est particulièrement bien adapté pour des gisements dont la minéralisation d'uranium est étendue et de faible teneur dans un aquifère perméable et confiné. Les principes fondamentaux de l'ISR sont présentés dans la première section du chapitre 1. La figure 1 schématise une exploitation d'uranium par ISR. Le champ de puits de la mine est subdivisé en blocs de production composés chacun d'une douzaine de puits producteurs et de plusieurs dizaines de puits injecteurs.

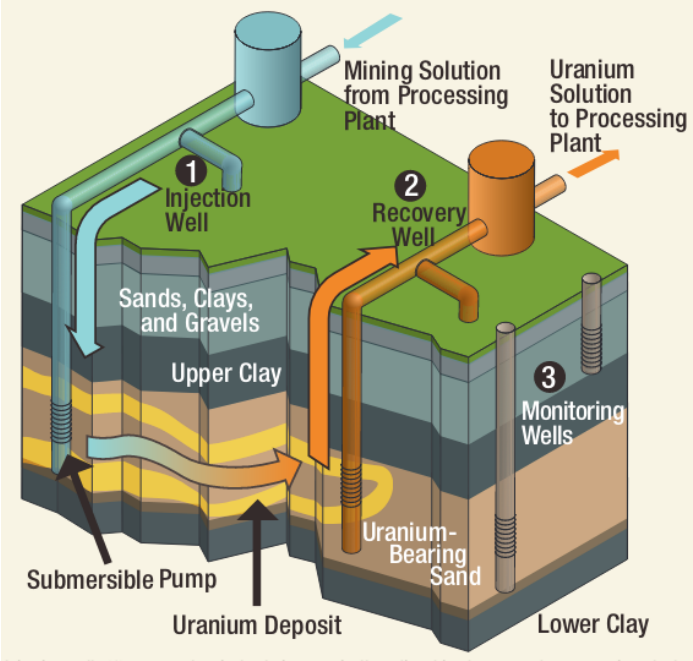

FIGURE 1 – *Schéma d'une exploitation par ISR, d'après Ivonne Couret [2013]*

Le Kazakhstan est un pays présentant de nombreux gisements d'uranium, [IAEA, 2016]. Certains d'entre eux sont exploités par l'entreprise Katco, une joint-venture entre l'entreprise française Orano Mining et l'entreprise kazakhstanaise Kazatomprom. Les gisements exploités sont situés entre 200 et 500 mètres de profondeur dans des horizons sableux fortement perméables. Ils sont confinés entre des horizons argileux imperméables. Ils sont donc adaptés à l'exploitation par ISR. La section 2 du chapitre 1 détaille les caractéristiques des gisements exploités.

Différentes propriétés synthétisent la géologie du gisement : le faciès géochimique des roches, la lithologie et la teneur en uranium. Les propriétés géologiques du gisement ont une répartition spatiale

hétérogène. Or la répartition des propriétés impacte l'exploitation de l'uranium. Par exemple, comme le montre la figure 2, le champ de perméabilité des roches contrôle la répartition des écoulements, et donc les apports en réactif au cours de l'exploitation. Ce phénomène fut étudié par De Lucia et al. [2011]. Afin d'estimer les ressources et les réserves du gisement, il est donc nécessaire de modéliser cette répartition. Les différentes méthodes de géomodélisation du gisement employées à Orano Mining sont présentées dans le chapitre 2. Chilès and Delfiner [2009] présentent une revue de ces méthodes. La géomodélisation utilise les mesures disponibles des propriétés du gisement pour inférer les modèles utilisés et pour conditionner les résultats de la modélisation. Les données disponibles dans notre cas sont uniquement mesurées dans les puits forés, et sont donc parcimonieuses. La géomodélisation permet d'obtenir la répartition des propriétés sur l'ensemble du domaine. Elle peut être déterministe, ou stochastique avec l'introduction d'une composante aléatoire reproduisant une incertitude. En effet, on observe plusieurs sources d'incertitude dans la géomodélisation : l'incertitude épistémique, qui représente l'incertitude sur les mesures et sur les paramètres du modèle utilisé, et l'incertitude aléatoire, qui représente la composante aléatoire d'un phénomène. Dans notre cas, l'incertitude épistémique est représentée par l'incertitude des mesures des propriétés géologiques aux puits et l'incertitude des paramètres des modèles stochastiques, par exemple. L'incertitude aléatoire peut, quant à elle, être représentée par la valeur de la graine du générateur de nombres aléatoires des simulations stochastiques. Elle se traduit par une différence de répartition des propriétés géologiques entre les différents résultats de simulation stochastique. Une simulation stochastique de la répartition spatiale des propriétés est appelé "une réalisation". Les travaux de la thèse sont centrés autour de l'impact de l'incertitude aléatoire de la répartition des propriétés géologiques sur la production d'uranium. Les différents jeux de réalisations du gisement constituent les données de base utilisées au cours de cette thèse.

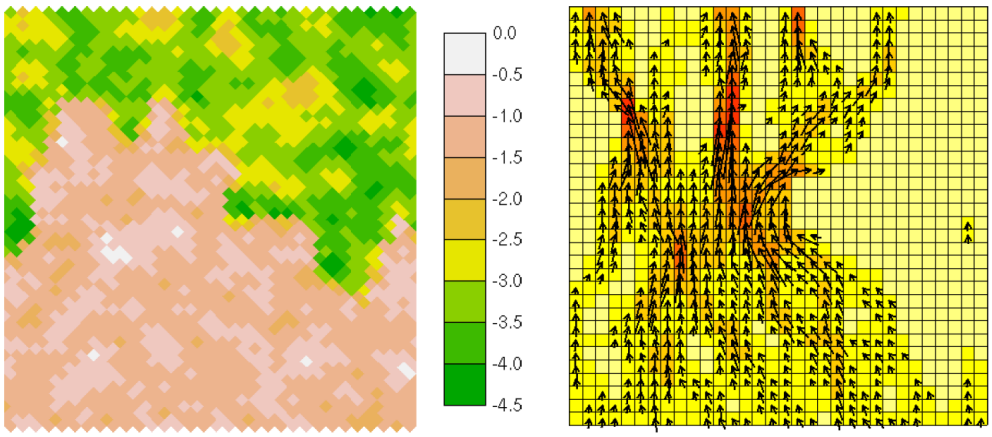

FIGURE 2 – *La répartition spatiale hétérogène des propriétés impacte les résultats des simualtions de transport réactif. Exemple d'un champ de perméabilité contrôlant les écoulement dans le réservoir, et donc l'apport en réactif au cours de la simulation, [De Lucia et al., 2011]. Le champ de perméabilité est présenté à gauche avec l'échelle logarithmique au centre. À droite sont représentés les vecteurs tangent à l'écoulement dans le milieu*

La modélisation couplée chimie transport de l'ISR donne un support scientifique et numérique d'aide à la décision de l'exploitant lors des opérations. Elle est effectuée à l'aide d'un code de simulation de transport réactif. Le transport réactif modélise l'écoulement d'un fluide en milieu poreux, le transport de solutés réactifs, et les réactions chimiques intervenant entre les solutés et le matériaux filtrant. La simulation de transport réactif dans l'ISR permet, entre autres, de calculer la production d'uranium au cours du temps. Les notions du transport réactif, son application à l'ISR, et quelques-unes de ses utilisations dans l'exploitation par ISR sont présentées dans le chapitre 3. Le transport réactif nécessite trois types d'entrée. Tout d'abord, il faut une base de données thermodynamiques des réactions chimiques considérées constituée d'après la littérature et des essais en laboratoire. Ensuite, le scénario d'exploitation, qui fournit les débits et la chimie du fluide injecté,

est nécessaire. Il est choisi de manière à présenter des valeurs similaires à celles de l'exploitation. Et enfin, la répartition spatiale des propriétés de la géologie. Le code transport réactif utilisé est Hytec [Van Der Lee et al., 2003], développé au Centre de Géosciences de MINES ParisTech.

La répartition spatiale des propriétés du gisement impacte le résultat des simulations de l'ISR. Or la répartition spatiale est incertaine et l'incertitude est modélisée à l'aide de multiples réalisations stochastiques de la géologie. La question se pose donc sur la manière de propager l'incertitude des paramètres d'entrée des simulations ISR dans la production d'uranium. La première section du chapitre 4 présente la méthode de propagation directe de l'incertitude. Elle consiste à simuler l'ISR de nombreuses fois en utilisant un grand nombre de réalisations différentes. Ainsi, l'incertitude de la répartition spatiale des propriétés est directement retranscrite en variabilité de production d'uranium. Cependant, une simulation ISR par transport réactif est très coûteuse en temps de calcul. Il n'est donc pas possible dans un cadre opérationnel d'effectuer la propagation directe. La solution est donc d'effectuer une propagation parcimonieuse de l'incertitude en simulant l'ISR avec un nombre restreint de réalisations judicieusement choisies. La propagation parcimonieuse s'appuie sur la méthode de réduction de scénarios développé par Scheidt and Caers [2009], et est présentée dans la deuxième partie du chapitre 4.

L'objectif premier de la thèse est de mettre en place des outils de quantification d'incertitude de la production d'uranium. Les travaux sont effectués à l'échelle du bloc de production. Le chapitre 5 décrit la propagation directe d'incertitude de deux blocs de production. Si la propagation directe n'est pas possible en contexte opérationnel, nous nous sommes permis ce temps de calcul dans le contexte de la thèse. Les différentes productions d'uranium obtenues par simulation ISR avec de nombreuses réalisations permettent d'échantillonner l'incertitude sur la production d'uranium des deux blocs. L'incertitude représentée est quantifiée à l'aide de la courbe de production médiane, et des courbes des premier et dernier déciles de production. La quantification de l'incertitude de production obtenue par propagation directe va ainsi servir de référence afin d'être comparée aux quantifications d'incertitude obtenues par réduction de scénarios.

La propagation d'incertitude parcimonieuse est fondée sur la sélection judicieuse des réalisations avec lesquelles simuler l'ISR. Il faut donc trouver un moyen de décrire les réalisations à l'aide d'un ou plusieurs proxys de la simulation de l'ISR. Un proxy de l'ISR calcule un résultat approché de la production d'uranium. Il est plus rapide qu'une simulation ISR par transport réactif. L'objectif est que la dissimilarité des résultats des proxys dans l'ensemble des réalisations reproduise la dissimilarité des résultats de simulation ISR. L'approximation des dissimilarités des productions d'uranium des réalisations par les proxys permet de sélectionner un faible nombre de réalisations dans lesquelles simuler l'ISR. Leurs productions d'uranium approximent donc la variabilité de l'ensemble des réalisations. Une approximation de la quantification d'incertitude peut être calculée sur la base de ces quelques réalisations.

Le point important de la réduction de scénarios est donc de développer des proxys capables de reproduire efficacement et rapidement la dissimilarité de production de l'ensemble des réalisations. La présentation des proxys développés au cours de la thèse et la comparaison des résultats de réduction de scénarios les utilisant avec la propagation directe font l'objet des chapitres 6, 7 et 8.

Les premiers proxys étudiés dans le chapitre 6 sont des quantités calculées directement à partir de la répartition des propriétés dans les réalisations. Ils extraient de l'information avec quelques grandeurs dont on suppose qu'elles influencent la récupération de l'uranium. On peut citer par exemple le tonnage de l'uranium dans les réalisations, ou le volume de roche contenant de l'uranium minéralisé. Ces proxys sont faciles et rapides à calculer puisqu'ils ne nécessitent pas d'effectuer de simulation de l'écoulement. Cependant, les tests montrent qu'ils ne permettent pas de reproduire la dissimilarité de production entre les réalisations de manière satisfaisante. Il est nécessaire d'utiliser des proxys prenant en compte le comportement hydrodynamique des réalisations lors de l'exploitation dans leur calcul.

L'utilisation combinée des proxys statiques et d'un proxy calculant le transport et la récupération de traceurs en solution dans l'aquifère est envisagée. Le chapitre 7 est consacré à la description des proxys développés et à l'évaluation de la qualité de la quantification d'incertitude par réduction de scénarios en les utilisant. Cependant, malgré une amélioration des résultats, il est encore nécessaire d'améliorer la description des réalisations en intégrant une dissolution contrainte de l'uraninite dans les proxys pour reproduire efficacement la dissimilarité de production.

Ainsi, deux proxys sont développés dans le chapitre 8 prenant en compte dans chaque réalisation la répartition spatiale des propriétés, son comportement hydrodynamique, et les contraintes de dissolution de l'uraninite. Il s'agit dans chacun des cas de simuler la dissolution d'un minéral traceur artificiel dont la répartition et les teneurs sont identiques à l'uraninite, et d'en calculer la récupération aux puits producteurs. La dissolution du minéral du premier proxy est uniquement contrôlée par une concentration maximale de traceur dissous. La dissolution du minéral du deuxième proxy est contrôlée par la même concentration maximale de traceur dissous avec un contrôle cinétique similaire à la dissolution de l'uraninite. Les résultats montrent que le deuxième proxy reproduit très bien la dissimilarité de production des réalisations et que la quantification d'incertitude approchée par réduction de scénarios utilisant ce proxy est très satisfaisante. Il est donc l'unique proxy nécessaire à la description des réalisations dans le cadre d'une réduction de scénarios d'un bloc de production. La méthodologie complète de quantification d'incertitude en ISR avec l'utilisation de ce proxy fait l'objet d'une publication dans Computationnal Geosciences.

Les règles et les consignes de gestion de l'exploitation à l'échelle de l'ensemble de la mine sur les prochaines années sont ce qu'on appelle le plan minier. Il planifie l'ensemble des actions des opérateurs de la mine, telles que les quantités de réactif à injecter, ou les dates d'ouvertures et de fermetures des blocs de production. Le plan minier définit un scénario d'exploitation de l'ensemble de la mine en respectant les contraintes hydrauliques du réseau de transport de fluide et des usines, et permet de s'assurer de l'atteinte de l'objectif annuel de production d'uranium. Un des paramètres d'entrée du calcul du plan minier est la prévision de production des blocs de production de la mine. Or, la production des blocs utilisée dans le modèle actuel de calcul du plan minier est actuellement modélisée par une unique courbe déterministe. Il n'y a pas de prise en compte de l'incertitude de production des blocs. Le chapitre 9 présente plusieurs cas d'application de propagation de l'incertitude de production des blocs de production dans un modèle approché de calcul de plan minier. Les résultats montrent le fort impact de l'incertitude de production à l'échelle du bloc de production sur le calcul des dates d'ouverture et de fermeture des blocs de production. Ils soulignent l'intérêt de prendre en compte la propagation d'incertitude dans le calcul du plan minier opérationnel.

Nous explorons également une autre voie qui s'avère complémentaire de l'approche la propagation parcimonieuse. Une des limites à la propagation directe de l'incertitude est le coût en temps de calcul des simulations ISR. L'importance du coût provient en grande partie de la résolution de la chimie au cours de la simulation. Le système des équations de réaction non-linéaires est résolu de multiples fois à chaque pas de temps et dans chaque voxel du réservoir. La quantité de données générée par ces calculs, et la résolution répétée de spéciation chimique nous ont amenés à envisager l'utilisation d'algorithmes d'apprentissage statistique pour résoudre la chimie. L'utilisation de méta-modèles de la spéciation dans le transport réactif permettrait un gain de temps considérable. Deux cas d'application sont présentés, avec l'utilisation de l'algorithme des k-plus proches voisins dans le premier cas, et d'un réseau de neurones profond dans le second. Le chapitre 10 présente notre exploration dans ce domaine nouveau, nos résultats prometteurs, et notre analyse quant aux possibilités de ces travaux.

Avertissement : *Les valeurs de productions d'uranium utilisées dans les différents calculs de cette thèse sont obtenues lors de simulations de l'ISR par transport réactif. Dans un souci de confidentialité, les échelles des valeurs de production d'uranium affichées dans les histogrammes et sur les graphiques sont modifiées. La modification est constante au cours du manuscrit, et permet donc la comparaison des graphiques tout au long de la lecture. Les modifications n'impactent que l'affichage et ne modifient donc pas les résultats présentés ni leur interprétation.*

Première partie

Contexte scientifique et industriel

Chapitre 1

Présentation générale de l'ISR

1.1 L'exploitation par ISR

1.1.1 Principe général

La Récupération In Situ (ISR), aussi dénommée Lixiviation In Situ, est une technique d'exploitation de minerai de plus en plus courante dans le monde. Elle se base sur la lixiviation sélective du minerai directement dans le gisement par une solution chimique injectée, puis repompée à la surface. La solution chimique injectée modifiera les conditions chimiques du fluide permettant l'oxydation et la dissolution des métaux. Dans le cadre de cette thèse, la solution enrichie en uranium dissous est récupérée par des puits producteurs et envoyée à des installations de traitement des solutions via un réseau de transport hydraulique. Les premières mines d'uranium exploitées par ISR ont vu le jour dans les années soixante en URSS et aux USA. La figure 1.1 présente le schéma d'une exploitation par ISR d'un dépôt d'uranium. Ces exploitations se sont développées et répandues jusqu'à atteindre 15% de la production mondiale dans les années quatre-vingt-dix, puis 46% en 2011 ([IAEA, 2016]). On en trouve désormais dans de nombreuses régions du globe : Australie, Chine, Kazakhstan, ... La majorité des gisements d'uranium exploités par ISR sont des gisements de type roll-front.

1.1.2 Les gisements de type roll-front uranifères

Les gisements de type roll-front sont des dépôts minéralisés formés dans des aquifères. La formation du dépôt est possible grâce à l'écoulement de l'aquifère et à la modification de ses caractéristiques chimiques permettant ainsi la précipitation et la concentration des minéraux uranifères.

L'uranium est présent sous deux états de valence dans la nature : U^{4+}, formant des complexes très peu solubles, et U^{6+}, plus soluble. La concentration du dépôt minéralisé provient de la dissolution d'une source primaire d'uranium par les eaux de surface, et de son transport en aquifère sous forme oxydée (valence IV) vers une zone réduite de l'aquifère. La réduction de l'uranium (VI) en uranium (IV) peu soluble va entraîner la précipitation de minéraux uranifères au front entre les deux zones de l'aquifère. La figure 1.2 présente une coupe schématique d'un roll-front classique.

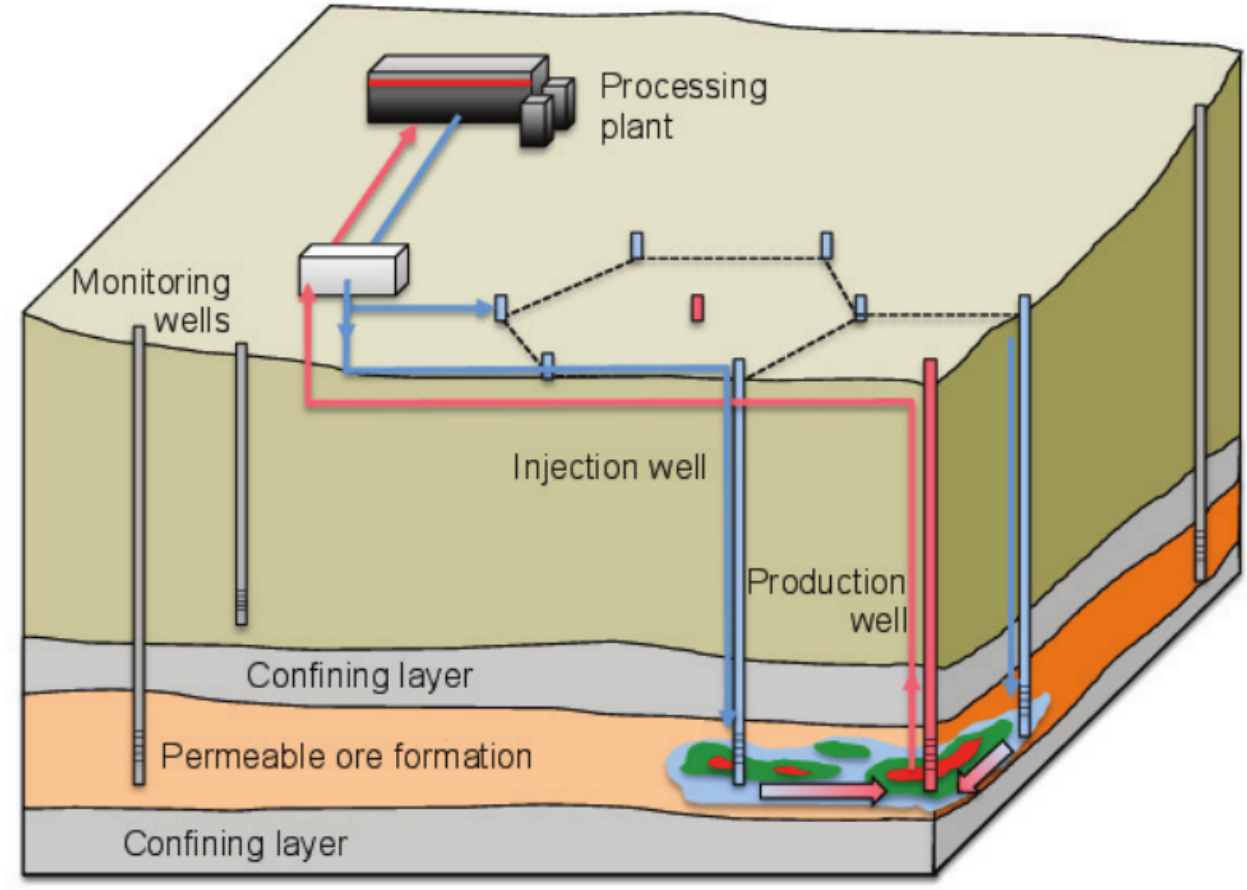

FIGURE 1.1 – *Schéma de l'exploitation d'un dépôt d'uranium par ISR, d'après [Lagneau et al., 2019]*

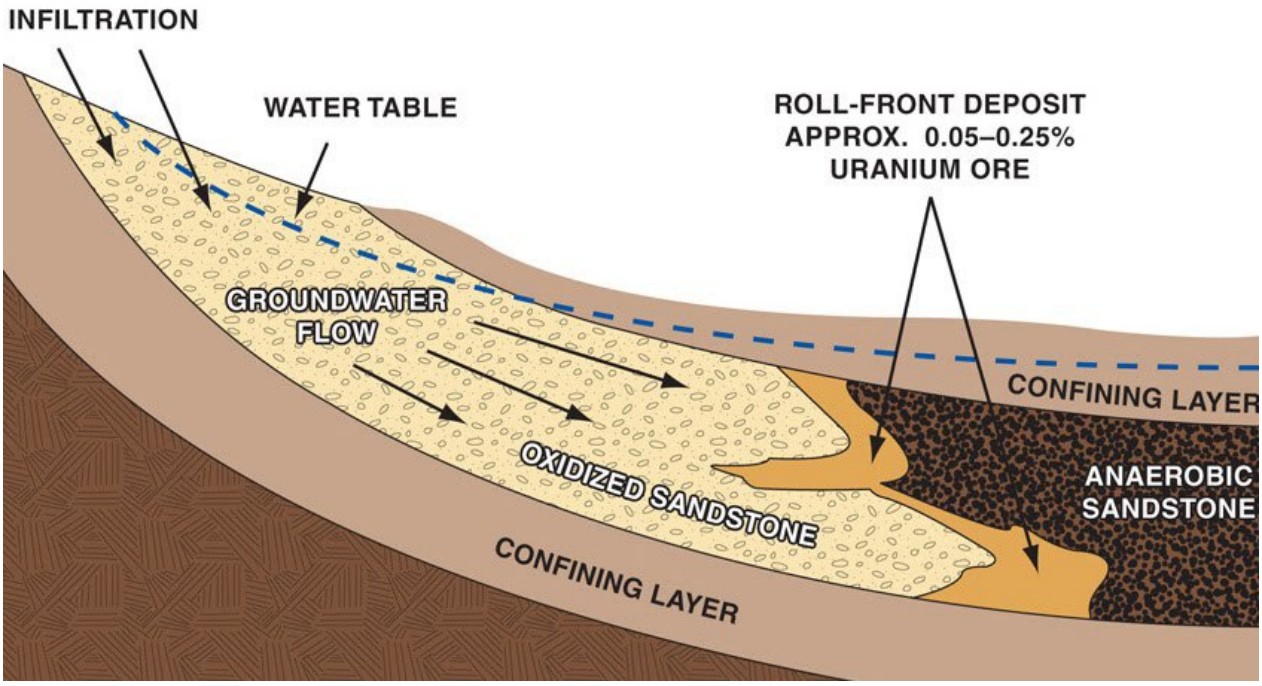

FIGURE 1.2 – *Schéma d'un gisement typique de roll-front, d'après [CauldronEnergy, 2015]*

1.1.3 Conditions de viabilité de l'ISR

L'ISR est une technique non conventionnelle d'exploitation des minerais. Son mécanisme particulier nécessite d'avoir un gisement respectant certaines contraintes. Ces contraintes portent sur l'hydrogéologie du milieu et sur sa minéralogie [IAEA, 2016].

Hydrogéologie

Les gisements les plus propices à l'ISR sont ceux situés dans des aquifères saturés, confinés et très perméables. La perméabilité est un paramètre déterminant de l'efficacité de l'ISR. Une perméabilité importante est une condition nécessaire à la bonne propagation du solvant dans le réservoir. De plus, même si une faible perméabilité initiale peut en partie être compensée en augmentant la pression d'injection, cette augmentation accroît le risque de colmatage mécanique des puits, c'est à dire qu'elle aura tendance à mettre en mouvement différentes particules solides qui risquent de boucher la porosité aux abords des puits, et donc de diminuer la productivité. Les gisements sableux couramment exploités par ISR ont une perméabilité plus ou moins hétérogène. Cette hétérogénéité contrôle à la fois la répartition des flux dans le réservoir et leur débit.

Le confinement, associé à une faible épaisseur de réservoir, est une condition nécessaire pour des raisons à la fois économiques et environnementales. Cela permet la concentration des fluides injectés dans la zone d'intérêt. Cela limite donc la dilution de la solution injectée, ce qui diminuerait son efficacité. De plus, le confinement permet de minimiser les pertes directes en uranium dissous en limitant le volume de fluide enrichi en uranium dissous non pompé par les puits producteurs. Enfin, environnementalement, le confinement du dépôt empêche la contamination d'aquifères voisins par les solutions injectées, et facilite le contrôle de l'évolution du milieu.

Minéralogie

La minéralogie du gisement est aussi un facteur contraignant la possibilité de mise en place de l'ISR. L'ISR repose sur la dissolution sélective des minéraux. La composition de la roche hôte, de la gangue et du minerai auront un impact direct à la fois sur la technique d'ISR utilisée, mais aussi sur la consommation des réactifs et sur la récupération de l'uranium.

Tout d'abord, l'utilisation de l'ISR pour exploiter l'uranium dépend des minéraux uranifères présents. La grande majorité des gisements d'uranium sont composés d'uranium (IV), insoluble à pH 7, et encore peu soluble en milieu très acide. L'uranium (VI) aura une bien plus grande facilité à former des complexes solubles. Et certains minéraux uranifères seront réfractaires à toutes formes de lixiviations.

Un autre point nécessaire est l'insolubilité des minéraux de la roche hôte. Il y a de nombreuses raisons sous-jacentes à cette contrainte, la plus importante étant de limiter la consommation des réactifs à la dissolution de minéraux d'intérêt pour l'ISR.

1.1.4 Processus chimique de l'ISR acide

Il existe deux principales méthodes d'exploitation d'uranium par ISR : la voie acide et la voie alcaline. Les cinétiques des réactions nécessaires à la dissolution des minéraux uranifères *via* la voie alcaline sont assez lentes, mais ces réactions présentent l'avantage d'être indépendantes des carbonates pouvant être présents dans le réservoir. À l'inverse, la voie acide a des rendements plus élevés, mais est fortement inhibée par la présence de carbonates dans le réservoir, ceux-ci consommant sans gain l'acide injecté [IAEA, 2016].

La faible concentration en carbonate dans les gisements considérés au cours de cette thèse permet l'utilisation de la voie acide. Celle-ci consiste en l'injection d'une solution enrichie en acide (généralement acide sulfurique) dans le dépôt. L'acidification du milieu va conduire à la dissolution de minéraux du réservoir libérant les oxydants nécessaires à la dissolution de l'uranium. L'uraninite et la coffinite, deux minéraux uranifères, font partie des minéraux exploitables par ISR.

FIGURE 1.3 – *Localisation des gisements de Muyunkum et de Tortkuduk*

1.2 Description du gisement exploité par Katco

Ces travaux ont été effectués sur les gisements de Tortkuduk et Muyunkun. D'abord exploités durant l'URSS, ils le sont aujourd'hui par Katco, une joint-venture entre le groupe kazakhstanais KAZATOMPROM et ORANO Mining (ex AREVA). Les caractéristiques de ces gisements sont présentées dans cette partie.

1.2.1 Géographie et géologie

Les gisements de Tortkuduk et Muyunkun se trouvent au Kazakhstan, pays d'Asie centrale de 2 717 000 km^2. Ces gisements se situent dans la province uranifère de Chu-Saryssu, au Sud du Kazakhstan, et plus particulièrement dans le district de Suzak. Cette province particulièrement riche en uranium comporte de nombreux gisements. La carte 1.3 montre la localisation de Tortkuduk et Muyunkum. Tortkuduk correspond au prolongement vers le Nord du massif de Muyunkum. Cette région est un massif désertique sableux favorable à l'exploitation minière.

La dépression de Chu où se situent Tortkuduk et Muyunkum est comblée par des sédiments du Jurassique au Quaternaire. La puissance totale du bassin pourra excéder les 1000 m dans certaines zones. Les horizons géologiques du Paléogène sont ceux qui contiennent de l'uranium. Ces formations sont : Kanjugan (Paléocène), Uyuk (Eocène inférieur), Ikansk et Intymac (Eocene moyen et Supérieur). Chacun de ces horizons est séparé des autres par des couches argileuses imperméables. Ils se trouvent entre 200 et 500 mètres de profondeur. Les minéralisations uranifères dans ces formations sont de type roll-front. Les gîtes sont situés au niveau du front d'oxydo-réduction. Leur longueur est de l'ordre du kilomètre à la dizaine de kilomètres et leur largeur entre 50 et 100 mètre. Leur épaisseur varie entre quelques mètres et moins de 20 mètres.

1.2.2 Minéralogie

Les sables de l'Ikansk, de l'Uyuk et du Kanjugan dans lesquels se trouvent les gîtes minéralisés sont de composition quartzo-feldspathique. Le ciment de ces roches est argilo-silteux. De plus, différents minéraux secondaires sont présents : des micas, des minéraux argileux (kaolinite, beidelite,

montmorillonite), de la matière organique, des minéraux accessoires et de la calcite.

Les minéraux uranifères sont principalement de l'uraninite et de la coffinite-pechblende, et font partie du ciment. Ils se trouvent principalement à la surface des grains détritiques.

1.2.3 Hydrogéologie

Les trois formations de l'Ikansk, de l'Uyuk et du Kanzhugan sont toutes confinées les unes par rapport aux autres grâce à des horizons argileux imperméables allant de 4 à 25 mètres. Les différentes études menées d'abord par VolkovGeologie puis par Katco donnent des valeurs de vitesses réelles d'écoulement régionnal de l'ordre de la dizaine de mètres par an avec un écoulement général du Sud-Est vers le Nord-Ouest.

1.3 Variabilité spatiale des propriétés géologiques du roll-front

D'après les études effectuées par VolkovGeologie et Katco, les différents réservoirs correspondent, comme environnement de dépôts sédimentaires, à des remplissages de chenaux fluviatiles et à des deltas dominés par les marées. Les processus génétiques de ces dépôts conduisent à une importante variabilité spatiale du système. Le premier niveau d'hétérogénéité correspond au dépôt de matériel détritique de granulométrie hétérogène en chenaux, et séparés par des lentilles discontinues d'argile. Cette première hétérogénéité du milieu conduit à une hétérogénéité dans l'écoulement de l'aquifère dans le réservoir, et donc des eaux oxydées. Ainsi un deuxième niveau d'hétérogénéité spatiale est créé lors de la formation du roll-front. La localisation du front d'oxydo-réduction dépend des mouvements d'eau oxydée dans le réservoir et de la répartition de la matière oxydante dans le milieu (matière organique, pyrite, ...). De même, la concentration de l'uranium dissous et sa précipitation au front redox sont influencées par l'hétérogénéité des flux, ce qui conduit à la formation d'une enveloppe minéralisée de géométrie complexe.

Ces niveaux successifs d'hétérogénéité, au cours de l'histoire du gisement, conduisent à des propriétés géologiques des réservoirs extrêmement variables dans l'espace, et dont la structure 3D est particulièrement complexe. La compréhension de cette structure est cruciale afin d'appréhender la complexité de la géologie et d'y adapter l'exploitation de ce gisement par ISR. Il est donc nécessaire d'effectuer un nombre conséquent de mesures des propriétés du gisement. Ces mesures sont ensuite utilisées pour construire un ou plusieurs géomodèles du dépôt.

Chapitre 2

Géomodélisation du gisement

2.1 Objectif de la modélisation géologique

La géomodélisation a comme objectif d'obtenir un ou plusieurs modèles numériques en deux ou trois dimensions de la géologie. Ces géomodèles servent à la fois de synthèse des données du gisement et comme outil de préparation, de gestion et d'amélioration de l'exploitation.

La construction d'un géomodèle passe par la synthèse d'une grande quantité et diversité de mesures du gisement. Celles-ci peuvent être de natures géophysiques, géochimiques, minéralogiques, pétrologiques,... Le travail de mise en relation de toutes ces données et leur interprétation permet de vérifier leur cohérence et d'améliorer la compréhension de la géologie modélisée.

Les modèles numériques de gisement sont des outils indispensables pour prévoir, gérer et améliorer l'exploitation. En effet, ces modèles permettent de calculer les ressources présentes dans les zones exploitées, et d'évaluer les coûts de création et de fonctionnement liés à l'exploitation.

De plus, les modèles géologiques servent de base pour simuler numériquement l'exploitation. Ainsi, ils sont essentiels lors des études de scénarios d'exploitation, d'impacts environnementaux, d'optimisation de production, ou de simulations prévisionnelles d'exploitation.

Pour ces diverses raisons, les géomodèles sont essentiels dans chaque projet minier. Les choix des méthodes mises en oeuvre lors de la construction des modèles sont donc cruciaux.

2.2 Données utilisées pour la géomodélisation

2.2.1 Mesures des propriétés du gisement

Campagnes de forages

Les gisements d'uranium exploités par ISR sont des gisements dont la teneur en uranium est relativement faible, de l'ordre de 0.01% à 2.5%. Cette faible concentration en uranium couplée à la relative profondeur des gisements de Tortkuduk et Muyunkum limite l'utilisation des mesures géophysiques d'exploration de surface. Ainsi, au cours la vie du gisement, différentes phases de forages se succèdent pour amasser des données sur le gisement.

Tout d'abord, il y a la phase d'**exploration**. Il s'agit de la phase de forage de reconnaissance, dont le but est de localiser le front d'oxydo-réduction et de caractériser les propriétés du réservoir. La densité de forage de cette étape est relativement faible par rapport aux autres phases. La maille en est de 200 mètres par 50 mètres. Ces forages sont très souvent carottés.

Ensuite vient la phase de **développement**, dont le but est de préciser la délimitation de la zone minéralisée et d'avoir une première estimation des ressources de la zone. Ces sondages sont principalement réalisés en destructif, mais parfois carottés. La maille de densité de forage est de 100 mètres par 50 mètres.

La dernière étape de forage est celle du forage des puits d'exploitation. Cette étape, dite **technologique** a pour but d'équiper le champ de puits pour l'exploitation. Lors de cette phase, les puits producteurs sont forés au centre d'hexagones de puits injecteurs de 40 mètres de coté. Cette géométrie permet de limiter à la fois les pertes de fluides acides dans l'environnement, et les pertes de

fluides enrichis en uranium, tout en ayant une bonne dispersion des fluides injectés dans le milieu. Un hexagone de puits injecteurs avec le puits producteur central s'appelle une cellule de production. Le regroupement d'une dizaine de cellules de production est nommé bloc de production. La carte 2.1 montre la répartition des puits des différentes phases de forage d'une des zones du gisement, ainsi que la géométrie de deux blocs de production adjacents.

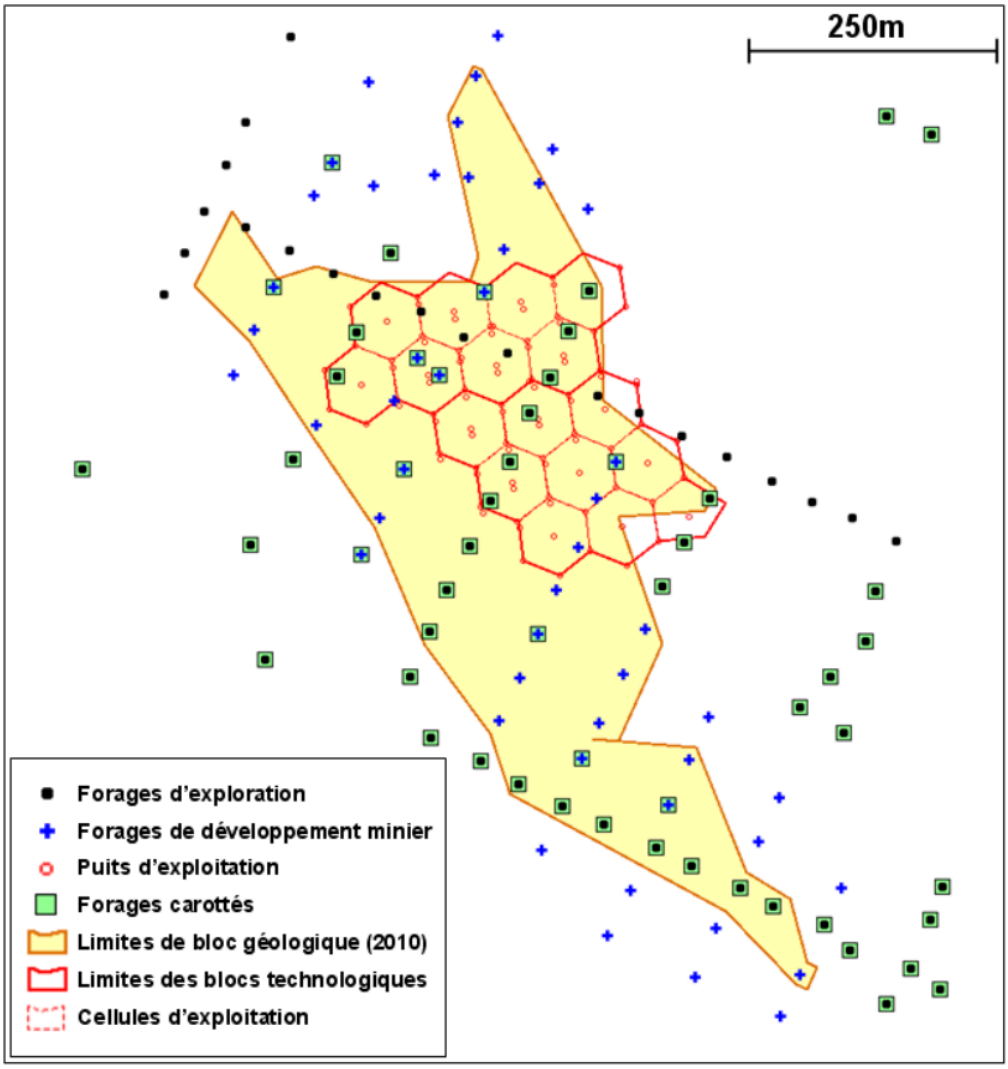

FIGURE 2.1 – *Exemple de répartition des forages sur le champ de puits en fonction des différentes phases de vie du gisement. On y observe la plus faible densité de forage de la phase d'exploration, puis les forages plus denses de la phase de développement, et enfin les forages de la phase technologique, avec en rouge les cellules de deux blocs de production, d'après Petit et al. [2012]*

Données obtenues lors des campagnes de forages

Au cours des différentes campagnes de forages, différentes mesures du sous-sol sont effectuées. Deux types de mesures sont faites : les mesures directes et les mesures indirectes.

Des mesures directes sont possibles lorsque les puits sont carottés. Dans ces cas où la roche est directement accessible, de nombreuses informations sont disponibles, notamment les propriétés géochimiques des formations. Ainsi, l'étude et l'interprétation des carottes sont particulièrement pertinentes afin de déterminer le faciès d'oxydo-réduction des roches et les minéraux qui les composent. Cependant, comme le montre la figure 2.1, tous les puits ne sont pas carottés.

Les autres mesures accessibles grâce aux forages sont les mesures géophysiques. Ces mesures sont effectuées dans chaque puits foré. Il s'agit de la mesure de la résistivité latérale du forage, et

des mesures de radiométrie Gamma. L'analyse de la diagraphie de résistivité latérale permet de l'interpréter en matière de lithologie. Cette lithologie servira ultérieurement à délimiter les zones perméables et imperméables du milieu. La radiométrie gamma, quant à elle, mesure le rayonnement gamma produit par la décroissance radioactive autour du forage. La transformation et l'interprétation de ce signal permet ensuite d'obtenir une teneur "équivalent radium". Un facteur de conversion est ensuite appliqué à cette teneur en radium pour la transformer en teneur en uranium [Garnier, 2014].

2.2.2 Synthèse des mesures de la géologie

Afin de synthétiser la géologie du dépôt en vue d'une modélisation ultérieure, les différentes mesures sont résumées à l'aide de trois propriétés : le lithotype (argile imperméable et sables perméables), le lithofaciès géochimique (zones oxydé, réduite et minéralisée) et la teneur en uranium.

Le lithotype

La première variable est le lithotype du réservoir. Cette variable est une synthèse de différentes données issues des analyses de forages et des carottes. Les multiples descriptions lithologiques des bases de données sont regroupées dans la propriété lithotype selon trois valeurs : les argiles, les sables fins et moyens, et les sables grossiers.

Cette propriété permet de représenter les paramètres pétrophysiques du gisement, avec notamment la représentation du mur et du toit des réservoirs, ainsi que les lentilles argileuses imperméables présentes.

Délimitation des unités géochimiques

La deuxième variable permettant de synthétiser la géologie du gisement est le lithofaciès géochimique. Le réservoir est modélisé selon le front d'oxydo-réduction et la minéralisation. Ainsi, cette variable catégorielle classe les roches du réservoir en stériles oxydées, stériles réduites et les roches contenant de l'uranium minéralisé en quantité économiquement suffisante, i.e. au delà de 0.01%. Cette classification des roches du réservoir selon qu'elles soient oxydées, minéralisées, ou réduites (OMR) comporte deux objectifs principaux : tout d'abord, cela permet de synthétiser les propriétés géochimiques et minéralogiques du gisement par faciès OMR, et deuxièmement, cela permet de délimiter l'enveloppe d'uranium minéralisée.

La classification des roches en l'un des trois faciès se fait par l'interprétation des mesures par des experts, et les valeurs des propriétés (géochimiques et minéralogiques) dans chaque faciès proviennent à la fois des mesures aux puits et de l'analyse par des géologues. La coupe géologique 2.2 illustre la complexité spatiale du gisement. Celle-ci est faite à partir de l'interprétation géologique des mesures aux puits. Sur cette coupe, les eaux oxydées de l'aquifère proviennent de la droite et s'écoulent vers la zone réduite à gauche. On y observe la présence de lentilles argileuses qui contrôlent les flux dans l'aquifère, et donc la géométrie du dépôt minéralisé.

Évaluation des réserves en uranium

La teneur en uranium est estimée aux puits d'après le signal de rayonnement gamma suivi de l'application d'un facteur de conversion. L'évaluation des ressources en uranium nécessite ensuite de concilier la délimitation de la minéralisation modélisée par le faciès OMR avec la variabilité des teneurs mesurées aux puits. Pour ce faire, la teneur en uranium est modélisée dans le volume minéralisé, permettant de fait de calculer le tonnage présent dans le gisement.

2.3 Modélisation déterministe de la géologie

De nombreuses méthodes existent afin de modéliser la géologie. Certaines d'entre elles permettent d'obtenir une unique représentation en 3 dimensions des différentes propriétés géologiques à partir de l'ensemble des données. Par exemple, l'interprétation des données de sondages par les géologues leur permet de définir les faciès OMR le long des puits, puis de construire des coupes 2D de la

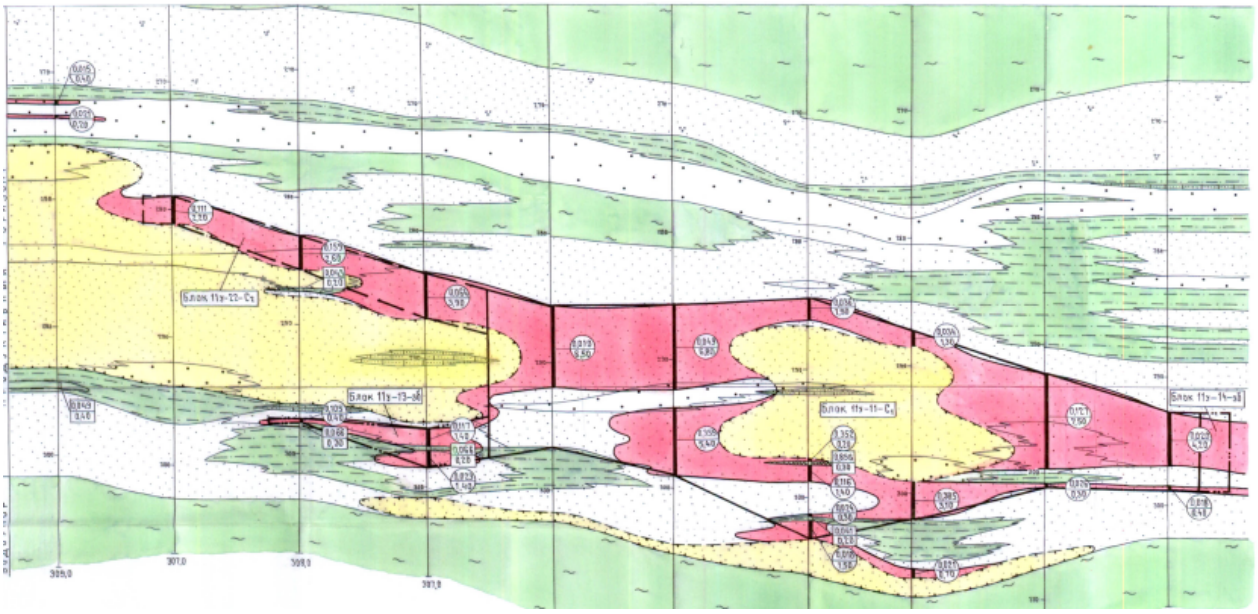

FIGURE 2.2 – *Exemple de coupe géologique d'un roll-front [Langlais et al., 2013]. La zone rouge correspond aux sables perméables contenant de l'uranium minéralisé. Celle en jaune correspond aux sables oxydés du réservoir, la roche réduite blanche correspond aux sables stériles, et en vert sont représentées les argiles (dans tous les cas stériles)*

géologie. Les limites de faciès des coupes peuvent ensuite être interpolées avec les coupes adjacentes pour construire les enveloppes minéralisées, comme le montre la figure 2.3.

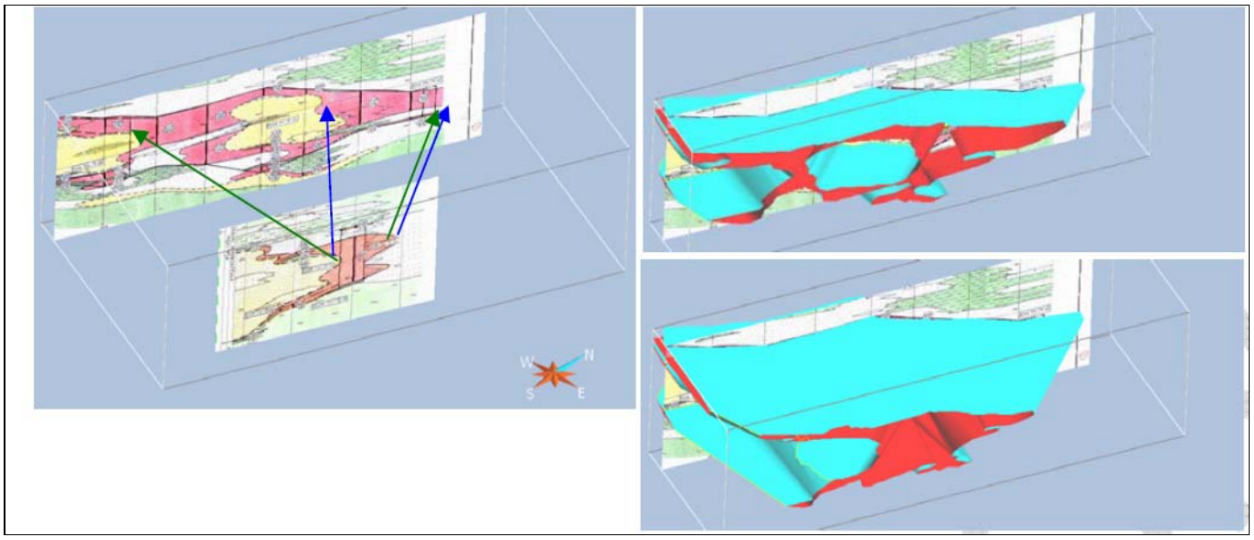

FIGURE 2.3 – *Interpolation d'enveloppe minéralisée à partir de coupes géologiques interprétées, d'après Langlais et al. [2013]*

Une autre catégorie de méthode déterministe de construction de modèles 3D de propriétés géologiques s'inspire du krigeage tel que développée initialement par Matheron, [Matheron, 1970]. La multiplication des modèles de krigeage depuis leur création leur permet de modéliser de nombreux milieux géologiques différents, et de nombreuses propriétés différents [Chilès and Desassis, 2018]. Les variables catégorielles sont calculées à l'aide de krigeage d'indicatrice, et les variables continues sont interpolées.

Cependant, les différentes méthodes déterministes présentent deux désavantages. Le premier est leur tendance à donner un résultat lisse non représentatif de l'hétérogénéité réelle de la propriété cible. Ainsi, ces méthodes ne représentent pas la variabilité à petite échelle des propriétés, qui a

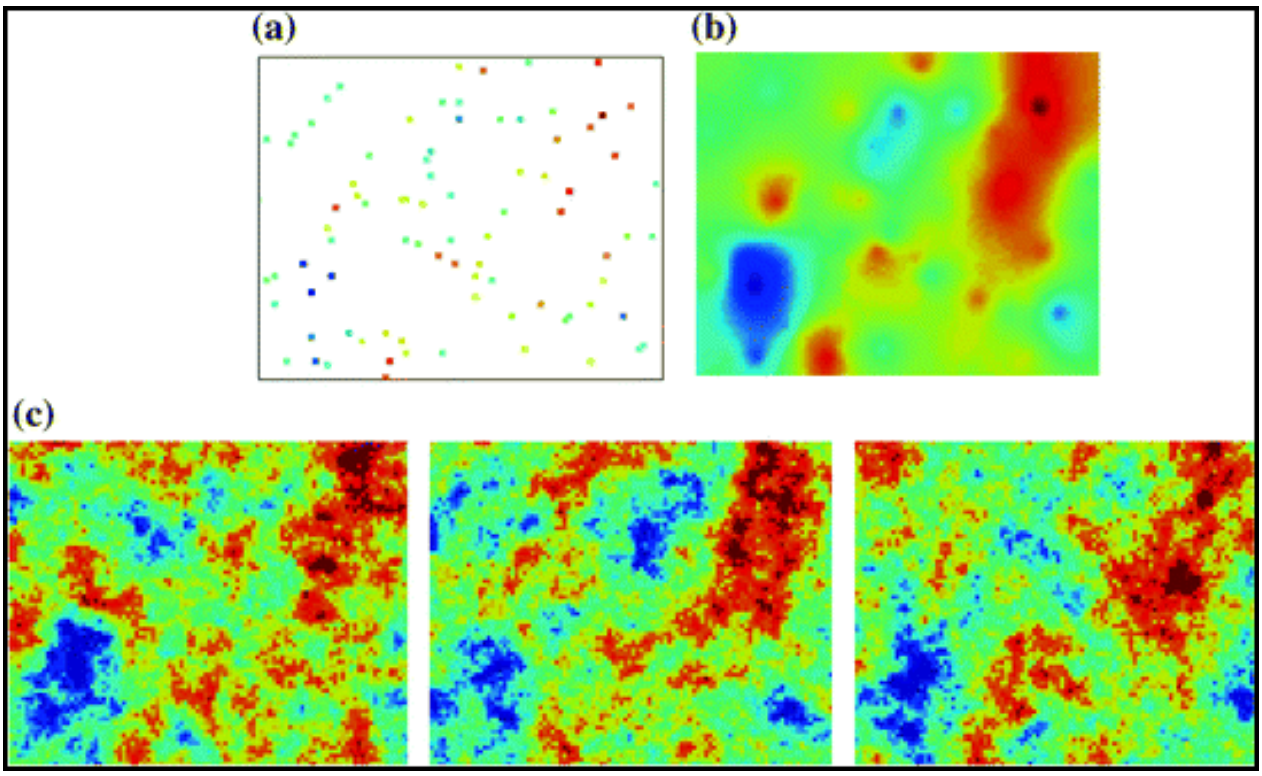

FIGURE 2.4 – *Comparaison entre le résultat d'un krigeage* ***(b)****, qui est déterministe, avec le résultat de trois simulations stochastiques* ***(c)****. Le krigeage comme le modèle de simulation stochastique sont conditionnés et inférés à partir des même données présentées en* ***(a)****, d'après [Tahmasebi, 2018]*

un impact important sur les écoulements et les réactions chimiques dans le gisement au cours de l'ISR. Pour le krigeage, par exemple, cet effet de lissage provient de la minimisation de la variance d'estimation.

Le deuxième désavantage de ces méthodes de modélisation est leur caractère déterministe. La principale finalité de la modélisation du gisement dans cette thèse est de pouvoir ultérieurement estimer l'incertitude sur la production d'uranium causée par l'incertitude sur la géologie. Les codes de simulation d'exploitation d'uranium par ISR n'utilisent qu'un seul modèle géologique en entrée des calculs. Ces codes de simulation d'exploitation sont déterministes. Pour échantillonner l'incertitude sur la production d'uranium, il faut créer des jeux de paramètres d'entrée des simulateurs qui sont représentatifs de l'incertitude de ces paramètres. De ce fait, il faut utiliser des outils de modélisation des propriétés permettant de représenter l'incertitude géologique par un grand nombre de simulations différentes. Les modèles géostatistiques probabilistes, c'est-à-dire où l'on fait une hypothèse sur la loi de probabilité des différentes variables étudiées, rendent justement compte de cette incertitude. On peut en générer des réalisations en grand nombre qui seront représentatives de l'incertitude géologique. Ces jeux de données représenteront un échantillon des distributions spatiales possibles des propriétés dans l'état actuel des connaissances du gisement.

En conclusion, la nécessité d'avoir un grand nombre de simulations de propriétés pour représenter l'incertitude du gisement, et d'avoir une méthode de modélisation capable de représenter l'hétérogénéité des propriétés invite à se tourner vers les modèles géostatistiques stochastiques. La figure 2.4 de Tahmasebi [2018] illustre l'intérêt de cette approche en comparant un krigeage de données avec trois simulations conditionnelles de ces mêmes données. On y observe les deux désavantages de la modélisation déterministe : à partir d'un jeu de données, on ne peut obtenir qu'une unique réalisation de la géologie, et la variabilité spatiale des propriétés à petite échelle n'est pas représentée (2.4(b)).

2.4 Modélisation stochastique

Les modèles géostatistiques stochastiques reposent sur une hypothèse sur la loi de probabilité spatiale de la fonction aléatoire modélisant la variable d'intérêt [Chilès and Delfiner, 2009]. Les paramètres des modèles sont inférés à partir des données disponibles. Des algorithmes de simulations sont ensuite mis en oeuvre pour générer des réalisations de ces modèles [Lantuéjoul, 2013]. La pertinence et la représentativité des réalisations dépendront, entre autres, du modèle et de la méthode de simulation choisie par l'utilisateur pour représenter la variabilité spatiale des données.

Dans notre cas, nous avons trois propriétés à modéliser : le lithofaciès OMR, le lithotype, et la teneur. Le faciès OMR est modélisé à l'aide de modèles stochastiques par gaussiennes tronquées. Le lithotype est modélisé à l'aide de modèles stochastiques par pluri-gaussiennes, et la teneur au niveau du voxel à l'aide d'un modèle de changement de support et d'une simulation directe de bloc.

2.4.1 Faciès Oxydé-Minéralisé-Réduit

Choix du modèle stochastique du faciès OMR

Rappelons que, de par sa genèse, les roches du réservoir peuvent être classées selon qu'elles sont réduites ou oxydées. De plus, les différents minéraux uranifères précipitent au niveau du front d'oxydo-réduction. On le définit comme l'interface entre les zones réduites et oxydées de l'aquifère. Cette propriété est donc constituée de trois valeurs : faciès stérile réduit, faciès réduit uranifère, et faciès stérile oxydé. Les trois valeurs de cette propriété catégorielle sont ordonnées de façon séquentielle. C'est pour cette raison que celle-ci sera modélisée à l'aide de gaussiennes tronquées.

Le principe de la méthode des gaussiennes tronquées est de simuler une fonction aléatoire gaussienne stationnaire en tout point du domaine d'étude. Les valeurs de la gaussienne sont ensuite converties en un lithotype ou un faciès, via une "règle de troncature". Cette règle se compose d'un drapeau, qui donne la règle de contact entre les faciès, et de seuils qui donnent les intervalles de valeurs de la gaussienne correspondant à chacun des faciès. Ces seuils sont choisis pour que la probabilité d'être dans chaque intervalle corresponde à la proportion du faciès de l'intervalle considéré. La figure 2.5 synthétise le principe des gaussiennes tronquées. Cette méthode fut développée initialement par Matheron à la fin des années 80 [Matheron et al., 1987].

La règle de troncature appliquée sur le facies OMR est présentée figure 2.5. On y observe dans ce cas que le faciès minéralisé (rouge) sera intercalé entre les faciès orange (oxydés) et bleu (réduits). Les faciès orange et bleu ne seront jamais en contact.

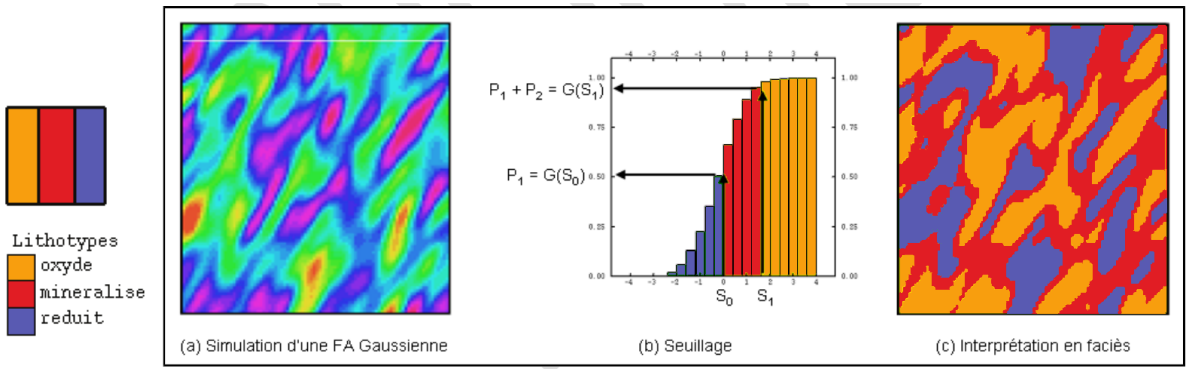

FIGURE 2.5 – *Présentation du principe des simulations gaussiennes tronquées sur le faciès OMR, d'après [Garnier, 2014]. La règle de troncature du faciès oxydé-minéralisé-réduit est présentée à gauche. La figure (**a**) présente le résultat d'une simulation de la fonction aléatoire gaussienne sous-jacente de la propriété, (**b**) montre les deux seuils de la gaussienne pour respecter les proportions de faciès et la règle de troncature, et enfin, (**c**) montre le résultat de l'application de ce seuil à la simulation de la gaussienne.*

Calcul de la matrice de proportions des faciès OMR

La non-stationnarité du faciès OMR implique que les seuils de la règle de troncature varient dans l'espace. Cette variation peut être à la fois horizontale et verticale. Pour modéliser cette variabilité, on construit une matrice de proportions qui caractérise la probabilité d'occurrence de chaque faciès en tout point du domaine. Cette probabilité détermine la proportion locale de chaque faciès.

Le calcul de la matrice de proportions s'effectue en plusieurs étapes :

1. L'ensemble du domaine est découpé en une grille à mailles larges et régulières.
2. À partir des sondages présents dans chaque maille du domaine, une courbe des proportions verticales (VPC) des faciès OMR est calculée dans les mailles contenant des sondages. Des VPC artificielles sont rajoutées dans les mailles n'ayant pas de forages. Elles sont construites d'après les données et leur interprétation géologique.
3. La troisième étape consiste à calculer les variogrammes expérimentaux sur les faciès des VPC, et à ajuster un modèle de variogramme sur ceux-ci.
4. Enfin, ce modèle de variogramme est utilisé lors du krigeage ordinaire des VPC sur une maille plus fine.

La figure 2.6 montre le passage des courbes de proportions verticales à la matrice de proportions 3D. Cette matrice de proportion permet d'obtenir la valeur des seuils de la règle de troncature en chaque point de la grille.

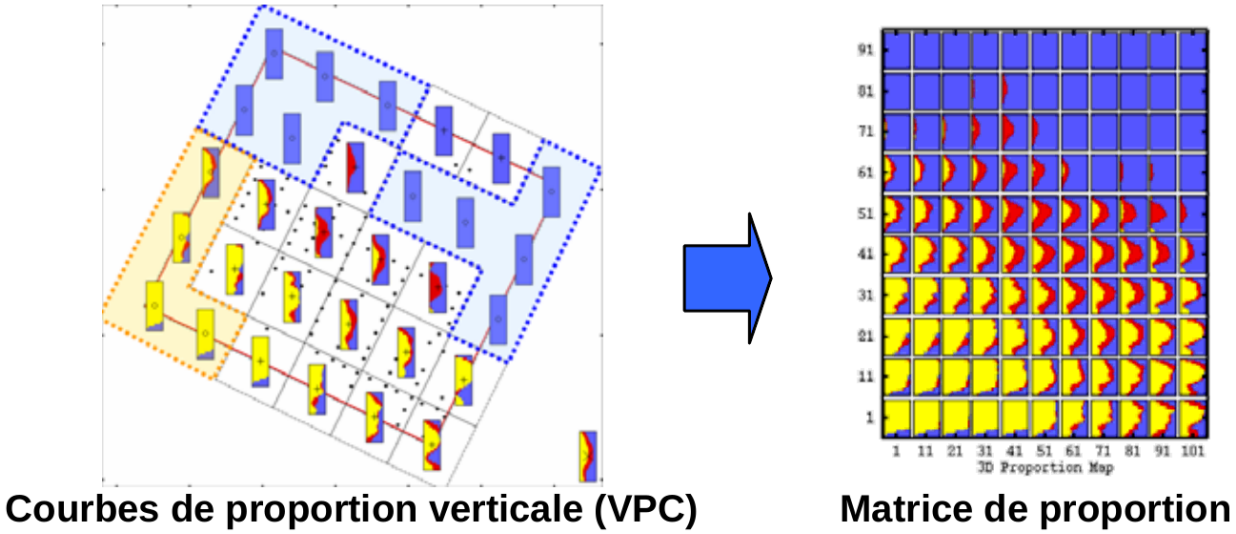

FIGURE 2.6 – *Passage des courbes de proportions verticales à la matrice de proportions, d'après [Garnier, 2014]. Les courbes de proportions verticales dans les mailles entourées en pointillés correspondent à des zones où aucun forage n'a été effectué. Ces courbes de proportions verticales sont rajoutées par l'utilisateur en fonction de l'interprétation géologique des données*

Simulation de la fonction aléatoire gaussienne sous-jacente

La règle de troncature et la matrice de proportions obtenues, il faut simuler la fonction aléatoire gaussienne sous-jacente dans chaque voxel de la grille. Pour cela, son variogramme expérimental peut être estimé à l'aide d'un algorithme développé par [Desassis et al., 2015] dans RGeostat, logiciel du centre de Géosciences de Mines ParisTech. Cet algorithme utilise les faciès aux puits, la règle de troncature, et la matrice de proportions pour estimer le variogramme expérimental par optimisation de sa vraisemblance. Le variogramme expérimental peut sinon être estimé par essai erreur. Un modèle de variogramme est ensuite ajusté à ce variogramme expérimental. La cohérence de celui-ci avec les variogrammes d'indicatrices des faciès est vérifiée.

Chaque simulation de la gaussienne sous-jacente est faite en plusieurs étapes :

- Les valeurs gaussiennes sont initialisées le long des puits en respectant les contraintes de faciès, puis l'échantillonneur de Gibbs permet leur modification jusqu'à reproduire convenablement le variogramme, [Geman and Geman, 1984] et [Freulon, 1994].
- La fonction aléatoire sous-jacente est simulée conditionnellement aux valeurs gaussiennes obtenues à l'étape précédente par krigeage conditionnant [de Fouquet, 1994]. Celui-ci repose sur la simulation d'une fonction aléatoire gaussienne qui est effectuée par la méthode des bandes tournantes [Matheron, 1973].

Une fois la simulation obtenue, les règles de troncature de la matrice de proportions permettent de convertir la simulation de la fonction aléatoire gaussienne en une réalisation de faciès.

2.4.2 Modélisation du lithotype lithologique par pluri-gaussiennes

La modélisation du lithotype lithologique (argiles, sables fins, sables grossiers) permet d'estimer les propriétés pétrophysiques de la roche. Cependant, le modèle de simulation par gaussienne tronquée devient insuffisant. En effet, en raison de surfaces érosives à la base des chenaux, chacun des trois lithotypes : argiles, sables fins ou sables grossiers, peut être en contact avec les deux autres. Ainsi, l'approche par pluri-gaussiennes, utilisant plusieurs fonctions aléatoires gaussiennes indépendantes, a été mise en oeuvre. La figure 2.7 présente le principe de la modélisation par pluri-gaussienne dans le cas de deux gaussiennes et trois faciès. La règle de troncature est présentée figure 2.7. Une fois la première gaussienne simulée, ses valeurs inférieures au premier seuil sont retenues, et représenteront le faciès argileux. Aux localisations où les valeurs de la première gaussienne dépassent le seuil, la deuxième gaussienne tronquée est utilisée pour déterminer le faciès sableux.

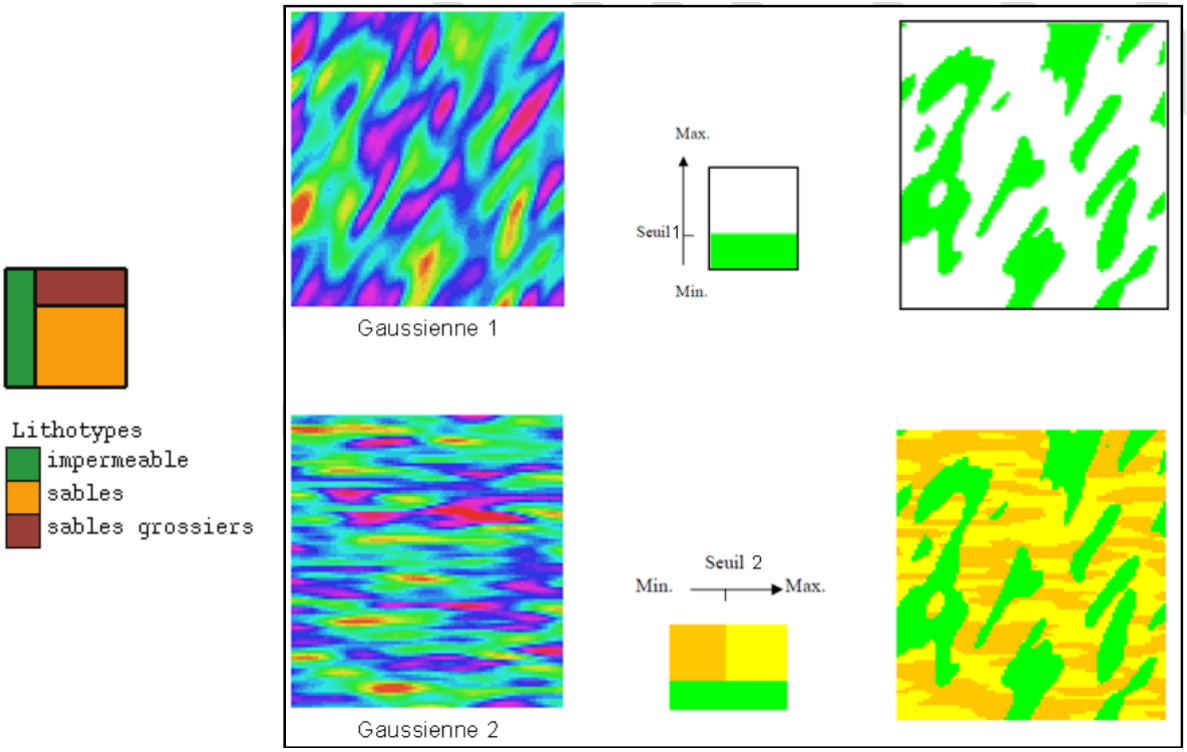

FIGURE 2.7 – *Présentation du principe de la modélisation par pluri-gaussiennes du lithotype, d'après [Garnier, 2014]. La règle de troncature utilisée est celle du lithotype, présentée à gauche. Les trois faciès peuvent être en contact.*

Calcul de la matrice de proportions du lithotype

De même que pour la modélisation des faciès, l'analyse de la proportion des lithotypes dans le domaine permet d'étudier la stationnarité de la propriété. Mais dans ce cas, contrairement au

faciès OMR, on observe une certaine stationnarité horizontale du lithotype, mais pas verticale. La matrice de proportions du lithotype est donc calculée sur l'ensemble du domaine comme la moyenne horizontale des VPC, comme le montre la figure 2.8.

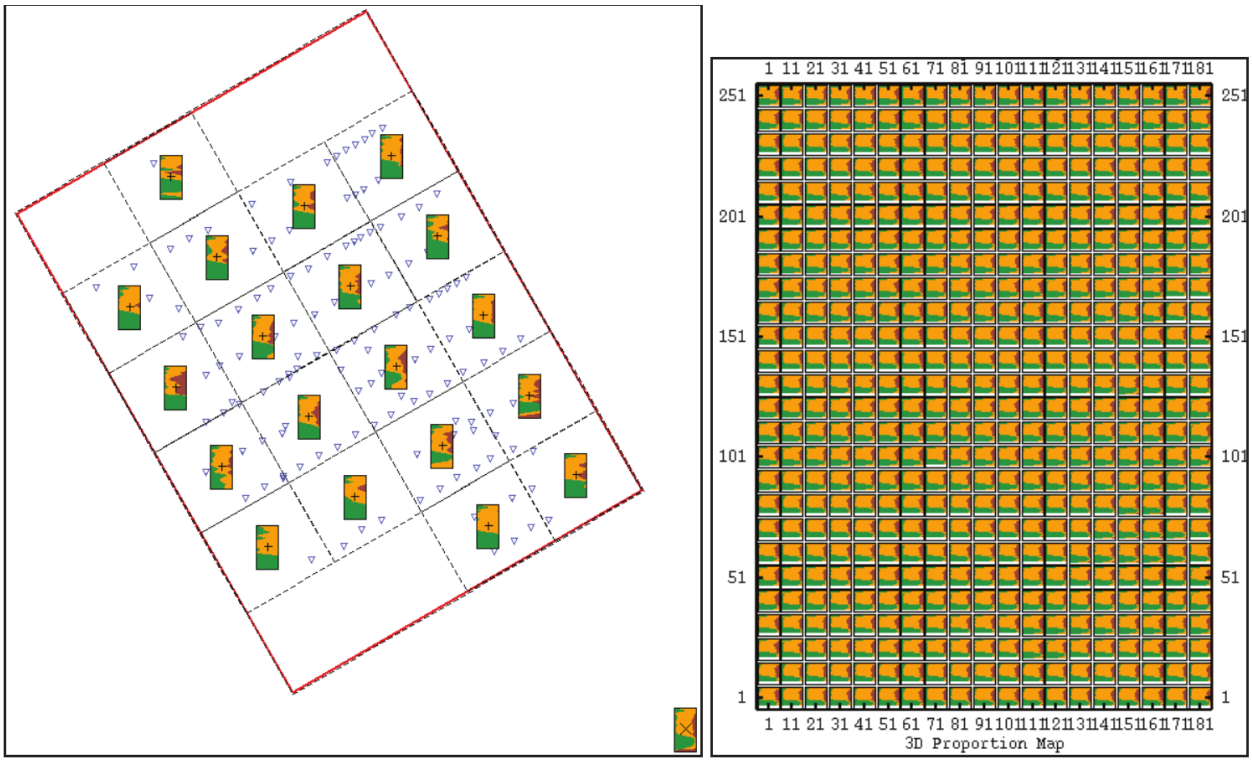

FIGURE 2.8 – *Passage des courbes de proportions verticales à la matrice de proportions 3D, d'après [Garnier, 2014]. Les courbes de proportions verticales dans les mailles étant globalement stationnaires horizontalement, les proportions de la matrice de proportions sont la moyenne de toutes les courbes de proportions verticales*

Simulation des gaussiennes sous-jacentes

Les simulations des 2 gaussiennes sous-jacentes se font indépendamment et selon les mêmes étapes que pour le faciès OMR. Une fois la simulation obtenue, la règle de troncature avec les valeurs de seuils est appliquée aux simulations des deux fonctions aléatoires sous-jacentes. Ceci permet la construction d'une simulation 3D du lithotype conditionnée aux données de puits.

2.4.3 Modélisation de la teneur

Anamorphose gaussienne des données

De même que le lithotype ou le faciès OMR, la teneur en uranium n'est connue qu'aux puits. Il est donc nécessaire de simuler la teneur sur le domaine considéré.

La teneur en uranium étant une variable positive et son histogramme présentant une forte dissymétrie (voir figure 2.9), on ne peut pas directement la modéliser par une fonction aléatoire gaussienne, qui est pratiquement le seule modèle pour lequel on dispose de méthodes de simulation. On a donc besoin de transformer les valeurs de teneurs en valeurs gaussiennes équivalentes. Ceci ce fait par le biais d'une fonction d'anamorphose, qui correspond à la modélisation de la fonction de répartition de la teneur. La méthode utilisée ici est l'anamorphose par polynômes d'Hermite, telle que développée dans [Lantuéjoul, 2013] ou [Wackernagel, 2003]. Un exemple de résultat est montré figure 2.9. À gauche se trouve l'histogramme réel des teneurs en uranium aux puits, et à droite l'histogramme des données anamorphosées.

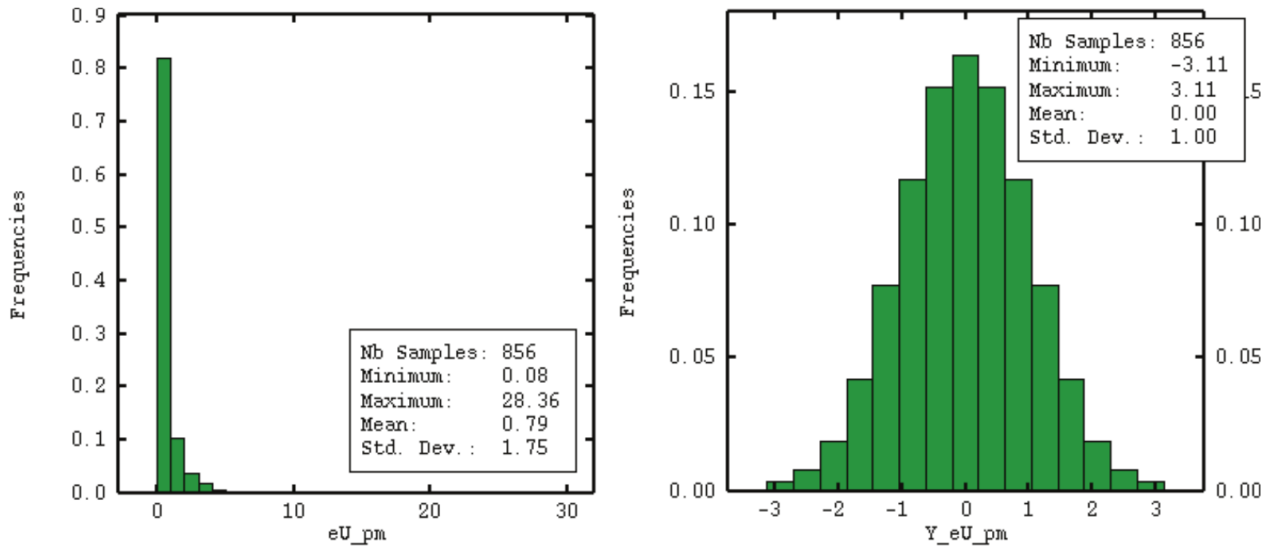

FIGURE 2.9 – *Transformation des mesures de teneurs (à gauche) en données gaussiennes (à droite) par anamorphose par polynômes d'Hermite*

Simulation conditionnelle de la fonction aléatoire gaussienne

Une simulation de la fonction aléatoire à valeurs réelles sous-jacente aux mesures gaussiennes est calculée partout dans le domaine considéré. Ceci se fait en plusieurs étapes. À partir des données anamorphosées, un variogramme expérimental est calculé, et un modèle de variogramme lui est ajusté. En utilisant ces données anamorphosées et le modèle de variogramme, on procède à la simulation conditionnelle de la fonction aléatoire gaussienne de la même manière que pour les gaussiennes sous-jacentes des modèles de gaussiennes tronquées (voir [Lantuéjoul, 2013] pour plus de détails).

Une fois cette simulation calculée, on applique l'anamorphose inverse aux champs simulés. Les teneurs sont simulées sur les mailles du domaine discrétisé, et non sur des points. Il s'agit donc d'un modèle stochastique sur des blocs (volume). L'algorithme utilisé est présenté par Deraisme et al. [2008] et est aussi décrit par Emery [2009].

2.4.4 Association des simulations du faciès OMR, du lithotype et de la teneur

Les trois modèles stochastiques sont simulés indépendamment les uns des autres. L'association de ces trois propriétés a pour objectif de représenter les variables nécessaires pour simuler l'exploitation. Un post-traitement des simulations est effectué lors de l'association d'une simulation du lithotype avec une simulation du faciès et une simulation de la teneur.

La première action du post-traitement concerne la mise en relation du facies OMR et du lithotype. En effet, en considérant les argiles imperméables, il n'est pas possible d'y avoir des apports en uranium dissous, ni même en eau oxydante. Ainsi, lors de l'association d'une simulation OMR avec une simulation du lithotype, les mailles à la fois simulées comme minéralisées et argileuses sont modifiées comme étant réduites et argileuses.

Finalement, la dernière étape de modélisation de la géologie est effectuée en associant une simulation des teneurs effectuée dans l'ensemble du domaine discrétisé avec une simulation du lithotype et du faciès OMR. Lors de cette étape, le champ de teneur est tronqué et uniquement conservé dans les mailles minéralisées et non argileuses. Pour des raison de stabilité numérique, il peut parfois être nécessaire de mettre une très faible teneur en uranium hors de la minéralisation dans les simulations.

La figure 2.10 présente en coupe verticale un exemple de simulation pour chacune des trois propriétés après le post-traitement. Pour la clarté de l'exposé, nous appellerons "une réalisation", un triplet de ces trois propriétés. Un très grand nombre de réalisations peut être construit assez rapidement pour représenter l'incertitude des propriétés géologiques du gisement. Cette incertitude représentée par les réalisations est l'incertitude dite aléatoire obtenue par la variation de la graine du générateur de nombre aléatoire lors des simulations. L'incertitude sur les mesures géologiques ou

les paramètres des modèles stochastiques (valeurs des seuils, variogrammes, ...) n'est pas étudié ici. On peut considérer qu'un grand nombre de ces simulations sera représentatif de la loi de probabilité du modèle géologique.

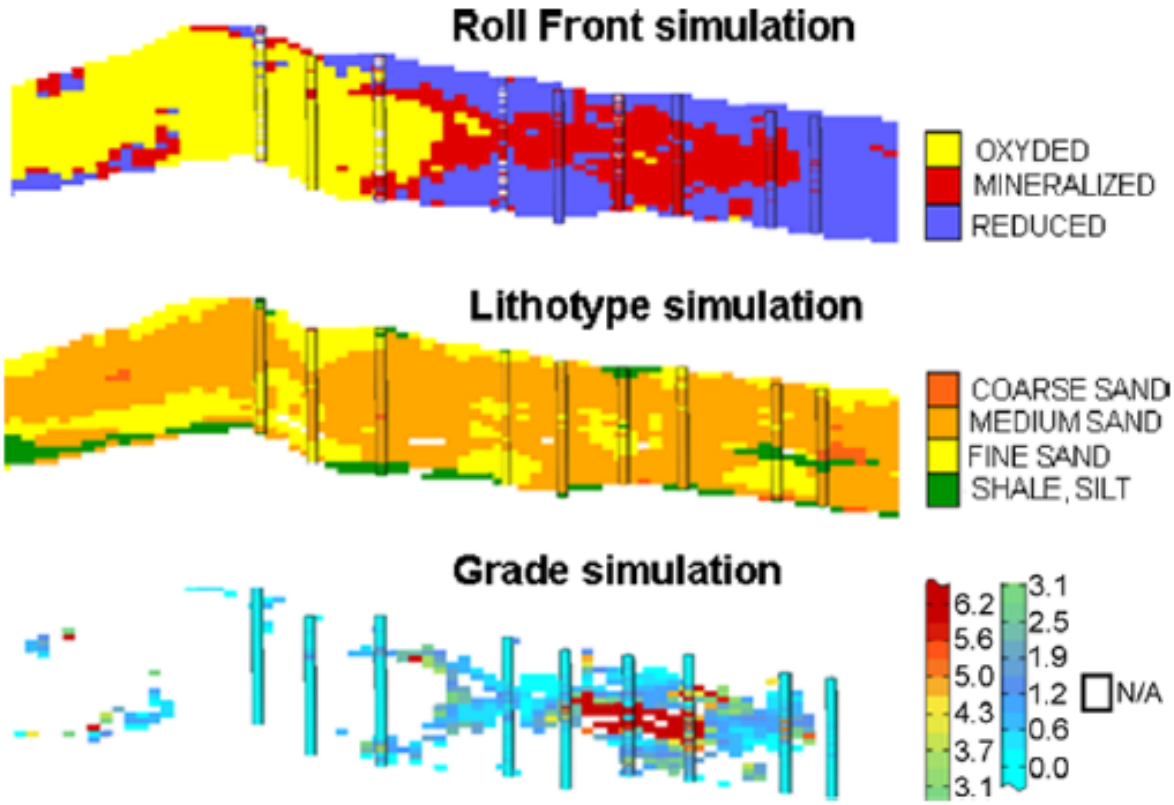

FIGURE 2.10 – *Exemple d'une réalisation du gisement, constituée d'un triplet de simulations des propriétés lithotype, faciès OMR et teneur en uranium, d'après [Petit et al., 2012]*

2.5 Conclusion de la géomodélisation

Les propriétés géologiques du gisement aux puits sont ainsi synthétisées en trois variables : le lithotype, qui contraint principalement la perméabilité des roches, le faciès OMR, qui contraint à la fois les propriétés géochimiques et minéralogiques, et la teneur en uranium dans les zones minéralisées.

Chacune de ces propriétés est modélisée selon un modèle géostatistique différent : le faciès OMR est modélisé à l'aide d'un modèle de gaussienne tronquée, le lithotype est modélisé par plurigaussiennes, et la teneur est modélisée par une fonction aléatoire gaussienne anamorphosée qui est simulée par bloc.

Chacun de ces modèles géostatistiques permet d'obtenir de multiples simulations 3D de la propriété associée. Pour chaque modèle, les simulations calculées sont conditionnées aux puits, respectent la même loi, sont équiprobables, mais toutes différentes. L'association des simulations de chacun des 3 modèles permet de construire de nombreuses réalisations de la géologie nécessaire aux simulations de l'exploitation. Dans chacune des réalisations, diverses quantités peuvent être calculées : le volume perméable, le volume perméable minéralisé, la quantité d'uranium disponible dans le volume perméable... Toutes ces quantités calculées pour un grand nombre de réalisations donnent une distribution de valeurs possibles permettant de quantifier l'incertitude sur la géologie. D'autres quantifications d'incertitudes sont possibles sur ces représentations de la géologie comme par exemple la distribution de probabilité pour chaque valeur dans chaque maille de la grille de discrétisation du domaine, ou l'entropie d'information dans chaque voxel.

On peut noter que cette modélisation des propriétés du gisement ne prend pas du tout en compte le processus de formation géologique. Les trois propriétés sont simulées indépendamment, alors qu'elles sont fortement liées. Il serait intéressant de construire une méthode de modélisation utilisant les dépendances des propriétés entre elles. De plus, le processus à modéliser se base sur des variogrammes non-stationnaires pour un processus non-stationnaire : la géologie du roll-front. Enfin, cette méthodologie ne tient pas du tout compte de l'erreur de modélisation. L'erreur de modélisation peut être conçue comme l'incertitude de modélisation, qu'il serait intéressant d'introduire dans le jeu de réalisations construites.

Ces estimations d'incertitudes sont faites sur les propriétés statiques de la géologie. Or, les processus impliqués au cours de l'exploitation du gisement sont très impactés par la distribution spatiale des propriétés géologiques. Ainsi, afin d'estimer la production d'uranium de chaque réalisation, il est nécessaire de simuler l'ISR. Cette modélisation de l'ISR pour estimer la consommation des réactifs, prévoir la production et étudier le comportement du gisement durant la production à partir de la simulation de la géologie, peut être faite à l'aide de codes de transport réactif qui sont décrit dans le chapitre suivant.

Chapitre 3

Modélisation de l'ISR par transport réactif

3.1 Introduction au transport réactif

Les simulations de transport réactif permettent de modéliser différents processus naturels ou industriels. Ces processus concernent en général les interactions entre les fluides et les matériaux poreux pour la représentation et la prédiction du transport d'espèces chimiques en milieu géologique ou anthropique. Steefel et al. [2015] présentent une revue des principaux processus d'intérêt visés par le transport réactif, qui font intervenir, de manière générale les points suivants :

- l'écoulement de fluides en milieu poreux selon les contraintes de charges (imposées par l'homme, ou non) ;
- le transport d'éléments en solution dans le fluide et/ou les flux d'énergie dans le milieu ;
- l'ensemble des modifications chimiques du système en respect des contraintes thermodynamiques telles que les réactions minérales, les mécanismes de sorption et de complexation de surface, les équilibres solide-liquide-gaz, ...

C'est l'ensemble des interactions et le couplage entre ces processus qui seront modélisés lors de simulations de transport réactif. [Steefel et al., 2005] présentent notamment dans sa revue de littérature quelques exemples d'utilisation du transport réactif dans la modélisation de différents processus naturels, tels que la migration de contaminants dans le sol ou la modélisation des flux et interactions physicochimiques entre différents milieux, comme l'interface entre les océans et les sédiments marins. En outre, divers processus industriels peuvent être modélisés à l'aide du transport réactif, comme le stockage de CO_2, [Knauss et al., 2005], la carbonation du béton par le CO_2 atmosphérique [Seigneur et al., 2020] ou l'exploitation de dépôts d'uranium par ISR, [Regnault et al., 2015] ou [Lagneau et al., 2019]. C'est dans le cadre de ce dernier point que les notions du transport réactif seront présentées.

En effet, les simulations de transport réactif permettent de modéliser les processus physico-chimiques mis en oeuvre dans l'exploitation par ISR. La représentation de l'ISR via la simulation de transport réactif permet d'améliorer notre compréhension des processus physico-chimiques en jeu au cours de l'exploitation. Une telle modélisation permet de faire des analyses de scénarios d'exploitation qui, *in fine*, permettent d'optimiser et prédire la production, et dès lors, aider à la planification de l'exploitation.

Ce chapitre est divisé en deux parties. La première présente les concepts de base du transport réactif. La deuxième partie présente l'application du transport réactif au cas de l'ISR.

3.2 Notions de base du transport réactif

3.2.1 Processus d'écoulement

La charge hydraulique

L'ISR consiste en un réseau de puits injecteurs et producteurs imposant un flux dans l'aquifère où se trouve le gisement grâce à un système de pompes. Ce système de pompes va créer une différence de pression dans cet aquifère. La charge hydraulique, notée h (m), d'un fluide incompressible dans un milieu poreux où les vitesses sont lentes, peut s'écrire :

$$h = \frac{p}{\rho g} + z \tag{3.1}$$

avec :
p la pression (Pa) au point de cote z (m),
ρ la masse volumique du fluide (kg/m^3),
g l'accélération de pesanteur (m/s^2).
Ainsi, les variations de pression induites par les pompes des puits modifient la valeur de cette charge, dont le champ de valeurs au sein du milieu contrôle l'écoulement. Il n'y aura pas d'écoulement dans le cas où la charge est uniforme dans l'espace. L'écoulement s'effectue des charges élevées vers les charges les plus faibles selon la direction du gradient.

La loi de Darcy

La loi de Darcy fut énoncée au XIX^{eme} siècle par Henry Darcy et est à la base des modélisations actuelles d'écoulement en milieu poreux. Cette relation permet de relier la vitesse de filtration (vitesse de Darcy) d'un fluide s'écoulant à travers un milieu poreux, à la conductivité hydraulique de ce milieu et à la différence de charge. Cette relation peut aussi être énoncée telle que :

$$\vec{U} = -K\overrightarrow{\text{grad}}(h) \tag{3.2}$$

avec :
$\vec{U}$ la vitesse de Darcy (m/s),
K la conductivité hydraulique (m/s),
h la charge hydraulique (m).

La perméabilité

Le gradient de charge hydraulique n'est pas le seul paramètre qui contrôle l'écoulement du fluide dans le milieu. Le deuxième paramètre à contrôler l'écoulement est la perméabilité des roches. Il s'agit d'une propriété intrinsèque du milieu dans lequel l'écoulement a lieu. La perméabilité correspond à la capacité d'un milieu à laisser s'écouler un fluide. Cette notion de perméabilité est intrinsèquement reliée à la loi de Darcy par la conductivité hydraulique. Ces deux grandeurs sont reliées par la relation :

$$K = \frac{k\rho g}{\mu} \tag{3.3}$$

avec :
K la conductivité hydraulique (m/s),
k la perméabilité intrinsèque du matériau (m^2),
ρ la masse volumique du fluide (kg/m^3),
μ la viscosité dynamique du fluide (kg/m/s)

La diffusivité

Dans le but d'accéder à la charge hydraulique en tout point du milieu et en tout instant, il faut résoudre l'équation de la diffusivité. Elle s'obtient par la combinaison de quatre équations : équations d'état isotherme du fluide et de la roche, équation de continuité et loi de Darcy, [Marsily, 1981]. Son expression est :

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \mathrm{div}[K\overrightarrow{grad}(h)] \tag{3.4}$$

avec :

S_s le coefficient d'emmagasinement (m^{-1}), qui se définit comme le volume d'eau qu'un volume unitaire d'aquifère peut libérer sous l'effet d'une variation unitaire de charge hydraulique.

h la charge (m),

K la conductivité hydraulique (m/s)

Le champ de vitesse de Darcy est déduit de cette expression.

3.2.2 Processus de transport

Une fois l'écoulement résolu, il faut considérer le transport dans le fluide des éléments dissous et en suspension. Trois mécanismes contrôlent ce transport :

- *l'advection* Ce mécanisme correspond à l'entraînement des éléments en solution par le fluide ;
- *la diffusion* Ce processus est un phénomène de transport irréversible qui homogénéise les concentrations dans le milieu par transport d'éléments de zones à forte concentration vers des zones de faible concentration ;
- *la dispersion* La dispersion est un phénomène de transport découlant de l'hétérogénéité du milieu, de l'hétérogénéité du champ de vitesses à l'échelle du pore et de la modification des concentrations en résultant.

Ainsi, ces différents phénomènes de transport peuvent être rassemblés dans une même équation décrivant la variation de concentration d'un soluté au cours du temps :

$$\frac{\partial wc}{\partial t} = \mathrm{div}(\underline{\underline{D}} \cdot \overrightarrow{\mathrm{grad}}(c) - c\vec{U}) \tag{3.5}$$

avec

w la porosité du milieu

c la concentration aqueuse (mol/Litre de solution)

$\underline{\underline{D}}$ le tenseur de dispersion et de diffusion de la concentration

et $\vec{U}$ la vitesse de Darcy intervenant dans la convection et définie dans l'équation 3.2.

3.2.3 Processus de spéciation chimique

La spéciation chimique dans les modèles de transport réactif peut être résolue de plusieurs manières. La résolution ce cette chimie nécessite une formalisation mathématique développée initialement par Morel [1983] et également présenté par de Windt et al. [2005]. Il s'agit de recenser toutes les espèces chimiques du système et les relations qui les lient. On peut définir chaque espèce du système d'après une relation à partir d'un nombre minimal d'espèces : les composantes de base. Ce nombre fini de composantes de base est une famille libre et génératrice au sens algébrique du terme. Ainsi, chaque espèce secondaire j du système peut être écrite comme une combinaison linéaire des composantes de base i. Cette combinaison linéaire est une réaction unique ayant pour réactifs les composantes de base et par les coefficients stoechiométriques : $\forall j, e_j \rightleftharpoons \sum_i \alpha_{ij} e_i$.

La loi d'action de masse de ces réactions permet de relier les activités K_j des composantes de base avec celle des espèces dérivées : $K_j = \frac{(e_j)}{\prod_i (e_i)^{\alpha_{ij}}}$ Les constantes d'équilibre de l'ensemble de ces réactions sont contenues dans une base de données. Notons que l'activité d'une espèce est donnée par le produit de sa concentration par son coefficient d'activité, représentant l'écart au cas idéal de solutions infiniment diluées. De plus, certaines réactions peuvent être contraintes cinétiquement.

Typiquement, les vitesses de réactions d'un minéral i sont souvent décrites par une constante cinétique, une surface réactive, l'écart à l'équilibre et d'un facteur catalyseur par une espèce j d'après l'équation 3.6

$$\frac{\mathrm{d}C_i}{\mathrm{d}t} = kS(\frac{Q}{K} - 1)C_j^{\alpha} \tag{3.6}$$

avec :

k la constante cinétique de réaction (mol/m^2/s),

S la surface spécifique (m^2/L),

K la constante d'équilibre,

Q le produit d'activité ionique,

α le coefficient de catalyse de la réaction par l'élément j.

Cette méthode de résolution de la chimie est celle utilisée par le logiciel CHESS, développé au centre de Géosciences de MINES ParisTech.

3.2.4 Couplage pour la modélisation par transport réactif

Le couplage entre l'écoulement, le transport et la chimie donne finalement un système d'équations couplées :

$$\frac{\partial w c_i}{\partial t} = \mathrm{div}(\underline{\underline{D}} \cdot \overrightarrow{\mathrm{grad}}(c_i) - c_i\vec{U}) + s_i - \frac{\partial w \bar{c_i}}{\partial t} \tag{3.7}$$

avec :

c_i la concentration totale mobile (mol/L de solution) de la composante i,

$$\forall i, c_i = [e_i] + \sum_{j_mobile} \alpha_{ij}[e_j] \tag{3.8}$$

s_i un terme source/puits (mol/L/s), qui représentera les puits producteurs et injecteurs dans le cas de l'ISR

et $\bar{c_i}$ qui représente la concentration totale immobile (mol/L de solution) de la composante i.

$$\forall i, \bar{c_i} = [e_i] + \sum_{j_immobile} \alpha_{ij}[e_j] \tag{3.9}$$

Le terme $\frac{\partial w \bar{c_i}}{\partial t}$ représente le terme de mobilisation/immobilisation des composés qui va modifier les concentrations en solution sujettes au transport. C'est le calcul de ce terme qui rend le système couplé et complexe.

Les différentes méthodes de couplage et de résolution possibles de l'écoulement, du transport transport et de la chimie ont donné lieu à une riche diversité de codes de simulation de transport réactif. Une revue des différentes méthodes de couplage en transport réactif est disponible dans Carrayrou et al. [2004]. Steefel et al. [2015] a effectué une revue des simulateurs les plus courants dont certains ont été testés lors d'une étude comparative de performance par Carrayrou et al. [2010]. Les simulations de transport réactif présentées dans cette thèse ont été effectuées avec Hytec, code développé au centre de Géosciences de l'école Mines ParisTech.

La résolution de la simulation par HYTEC est faite sur un schéma à volumes finis, en utilisant une discrétisation spatiale sur des polygones de Voronoï. On notera qu'un maillage régulier est un cas particulier de maillage de Voronoï.

Le couplage des équations de transport et de chimie peut être fait de deux manières différentes. Soit la résolution est simultanée, dans une approche dite globale, soit celle-ci est séquentielle, où la résolution du transport est séparée de la résolution de la chimie. La justesse du résultat à chaque pas de temps de la simulation est obtenue par itération entre la résolution de la chimie et du transport jusqu'à la convergence des résultats. C'est cette deuxième méthode qui est appliquée dans Hytec. La figure 3.1 présente schématiquement la résolution séquentielle itérative d'Hytec.

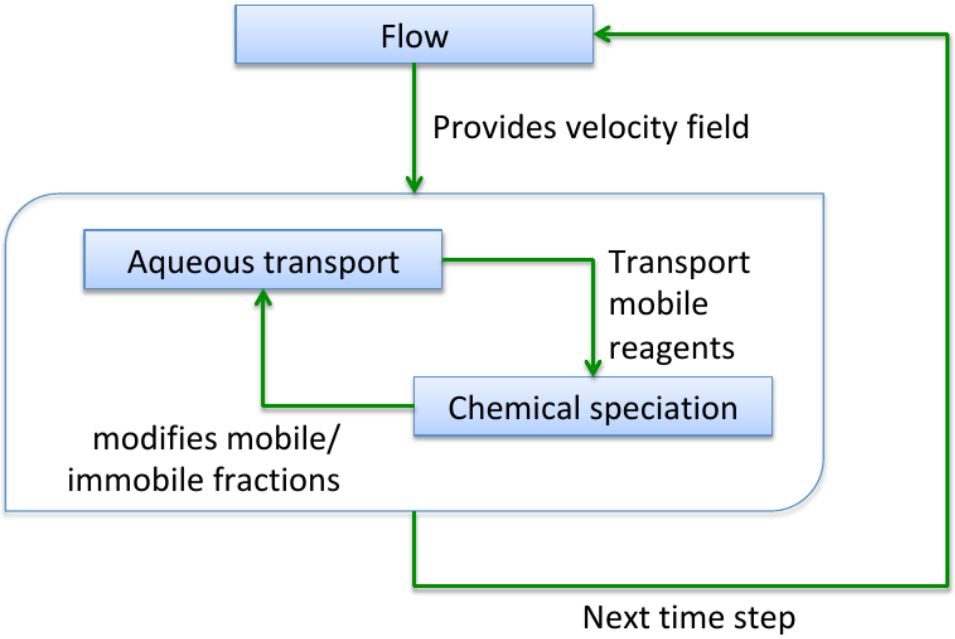

FIGURE 3.1 – *Schéma de résolution du modèle de transport réactif par le logiciel Hytec, extrait de Lagneau et al. [2018]. Il illustre la résolution séquentielle selon le temps du modèle avec un certain nombre d'itérations pour faire converger les résultats du transport et de la chimie*

3.3 Application d'un code de transport réactif à l'ISR

3.3.1 Intérêt de la modélisation de l'ISR par transport réactif

La construction de simulation de transport réactif à l'échelle du bloc de production se base sur la combinaison de paramètres hydrogéochimiques, et de la compréhension des mécanismes en jeu au cours de l'exploitation. Différents auteurs ont déjà étudié les intérêts de la modélisation de l'ISR par transport réactif, par exemple Lagneau et al. [2019] ou Regnault et al. [2015]. Les résultats de ces simulations peuvent être utilisés pour améliorer la compréhension des processus impliqués dans l'ISR, guider l'optimisation de l'exploitation, améliorer le calcul de la prévision de production ou encore pour anticiper l'incertitude de cette production.

3.3.2 Modèle géologique

Le modèle géologique utilisé pour représenter les paramètres du milieu est celui construit lors de la phase de géomodélisation du gisement. Il s'agit donc d'introduire une réalisation des propriétés "lithotype", "OMR" et "teneur" en entrée pour chaque simulation de transport réactif. Ce modèle géologique est conçu pour reproduire les hétérogénéités spatiales du milieu.

Le modèle géologique représente la géologie du gisement dans un bloc de production en 3D. Selon les modèles, les mailles seront de tailles 5x5x1 m^3 ou bien 10x10x1 m^3. Selon la discrétisation du réservoir et la taille du domaine considéré, chaque réalisation fera entre 150 000 et 2 500 000 mailles.

3.3.3 Modèle hydrodynamique

L'hydrodynamisme du modèle est synthétisé en quelques paramètres. La porosité est homogène quel que soit le lithotype et est égale à 23%. La conductivité hydraulique, quant à elle, est homogène dans chaque faciès. Elle est égale à 10^{-4} m/s dans les faciès perméables et à 10^{-9} m/s dans les faciès imperméables. Une dispersivité de 0.2 m, qui intervient dans le tenseur de dispersion, et un coefficient effectif de diffusion de 10^{-10} m^2/s sont utilisés. Les écoulements gravitaires liés à la différence de

densité des fluides sont aussi considérés.

3.3.4 Modèle géochimique

Modèle géochimique des roches

Les processus géochimiques en milieu géologique sont intrinsèquement compliqués à paramétrer. Tant les réactivités minérales que les capacités de sorption dépendent fortement de paramètres inaccessibles tels que les surfaces spécifiques et l'accessibilité de certains minéraux vis à vis du fluide. En outre, il existe de nombreuses phases minérales, distribuées de manière non-uniformes, qui sont parfois difficiles à détecter ou quantifier. Dès lors, un modèle géochimique doit effectuer des choix qui ont pour but de capturer les processus et minéraux les plus importants (réactifs) :

- dans chaque faciès, le choix et la répartition spatiale des minéraux d'intérêt ;
- la valeur de surface spécifique pour chaque minéral ;
- l'exclusion de certaines espèces chimiques du système, soit car leur concentration est négligeable, soit car leur existence est thermodynamiquement possible, mais non observée dans les faits ;
- les réactions chimiques considérées à l'équilibre, et celles considérées comme lentes ;
- les valeurs des constantes cinétiques de réaction, et des éventuels effets catalyseurs.

Ce modèle est construit à la fois d'après les données provenant des descriptions minéralogiques des carottes, mais aussi grâce à la comparaison des résultats de simulations de transport réactif avec les résultats réels de l'exploitation. Cette comparaison permet d'améliorer la compréhension des phénomènes impliqués dans l'exploitation, et donc d'améliorer le modèle géochimique utilisé dans chaque faciès. Un modèle géochimique donné pour un bloc de production peut être modifié afin d'ajuster les résultats de la simulation de transport réactif aux données de production. Comme le montrent Lagneau et al. [2019], cet ajustement jusqu'à une date de production donnée peut ensuite être utilisé comme prédiction du comportement du bloc de production.

L'assemblage minéralogique du modèle géochimique dépend à la fois du faciès et de la localisation géographique. Le tableau 3.1 synthétise la présence des minéraux dans le modèle des différents faciès du réservoir. La cristobalite représente la fraction minérale qui compose la majeure partie du réservoir. Elle donne une bonne représentation de la réactivité des grains de sable (quartz). Tous les processus consommateurs de protons survenant tôt dans l'exploitation sont agrégés selon une phase unique : la calcite. La beidellite (argile) et la goethite (hydroxyde de fer) sont des consommateurs de protons mais producteurs d'ions Fer(III) nécessaires à la dissolution oxydative de l'uraninite. L'uraninite, quant à elle, est présente dans le faciès minéralisé, et sa concentration est hétérogène au sein du faciès. Les valeurs de concentration sont données par les réalisations géostatistiques.

Minéral	Teneur dans le faciès oxydé	Teneur dans le faciès Minéralisé	Teneur dans le faciès réduit
Quartz (Cristobalite-α)	**Uniforme**	**Uniforme**	**Uniforme**
Smectite (Beidellite Fe)	**Uniforme**	**Uniforme**	**Uniforme**
Kaolinite	**Uniforme**	**Uniforme**	**Uniforme**
Calcite	**Uniforme**	**Uniforme**	**Uniforme**
Goethite	**Uniforme**	Absent	Absent
Uraninite	Absent	**Variable**	Absent

TABLE 3.1 – *Modèle minéralogique par faciès dans le réservoir. La concentration en uraninite est donnée par les réalisations*

Chimie des fluides injectés

La première étape de mise en exploitation d'un bloc est la phase d'acidification. L'objectif est de faire diminuer le pH de l'aquifère en dessous de 2 afin de permettre la dissolution des argiles libératrices d'ions Fe(III), permettre la mobilité du Fe(III) et de permettre la mise en solution d'uranium. Cette diminution du pH est provoquée par l'injection d'acide sulfurique, jusqu'à 20 g/L en début d'exploitation. Lors de la phase d'acidification, on observe la dissolution de minéraux accessoires stériles (Calcite). Une fois cette phase d'acidification passée, il n'est plus nécessaire d'injecter de telles quantités d'acide. La concentration d'acide dans le fluide d'injection diminue donc au cours du temps.

Le fluide extrait aux puits producteurs et traité à l'usine pour en extraire l'uranium est réutilisé et réinjecté aux puits injecteurs.

Ainsi la composition des fluides injectés évolue au cours de l'exploitation. Dans le cas de simulations de transport réactif effectuées sans avoir les données d'exploitation du bloc, il s'agit d'hypothèses de variations de concentration en acide sulfurique et en ions Fe(III) dans les fluides d'injection.

Principales réactions ciblées par le modèle

Quelques réactions permettent de synthétiser les processus chimiques de la lixiviation acide. Les deux réactions gouvernant la dissolution de l'uranium sont :

$$\text{Uraninite} + 2\text{Fe}^{3+} \rightleftharpoons \text{UO}_2^{2+} + 2\text{Fe}^{2+} \tag{3.10}$$

$$\text{Coffinite} + 2\text{Fe}^{3+} \rightleftharpoons \text{UO}_2^{2+} + 2\text{Fe}^{2+} + \text{SiO}_{2(\text{aq})} \tag{3.11}$$

La mise en solution de l'uranium repose sur la disponibilité d'ions Fe(III) dans le réservoir, la solubilité de l'uranium, et les cinétiques de réactions. Il est vérifié dans ce cas que la disponibilité de l'oxydant est le facteur limitant (Lagneau et al. [2019]). Ainsi, la spéciation de l'uranium en coffinite ou uraninite n'est pas déterminante.

Les réactions de dissolution de la gangue des roches du réservoir sont aussi extrêmement importantes, puisqu'elles contrôlent le pH du réservoir et sont d'importantes sources d'ions Fe(III), [Robin et al., 2016].

$$\text{Calcite} + 2\text{H}^{+} \rightleftharpoons \text{Ca}^{2+} + \text{CO}_2(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} \tag{3.12}$$

$$\text{Beidellite} + 7.32\text{H}^{+} \rightleftharpoons 0.165\text{Mg}^{2+} + (2.33 - \text{x})\text{Al}^{3+} + \text{xFe}^{3+} + 3.67\text{SiO}_2(\text{aq}) + 4.66\text{H}_2\text{O} \tag{3.13}$$

Ainsi, à partir d'une distribution spatiale des propriétés obtenues par simulation géostatistique, et du modèle hydrogéochimique utilisé pour simuler le transport réactif, on peut désormais simuler l'exploitation d'uranium par ISR. Les simulations ISR-U permettent d'améliorer notre compréhension des processus impliqués dans l'exploitation, et d'en prédire le comportement au cours du temps.

Chapitre 4

Propagation de l'incertitude géologique

4.1 Propagation directe de l'incertitude

Les simulations stochastiques du modèle de gisement permettent de représenter l'incertitude résultant de notre méconnaissance du milieu. Chaque réalisation est contrainte par les données mesurées aux puits, la structure spatiale des réalisations respecte celle des mesures grâce aux variogrammes et reproduit l'histogramme des données.

Ces multiples réalisations permettent déjà d'évaluer l'incertitude de quelques quantités, comme la ressource présente ou le volume de roche perméable. Cependant il n'est pas immédiat de calculer l'incertitude sur les réserves, sur la production d'uranium, ou sur la consommation des réactifs. Afin d'évaluer l'incertitude sur la production d'uranium et afin que ce résultat soit statistiquement représentatif, l'exploitation par ISR doit être simulée pour un grand nombre de réalisations. Cela permet de simuler l'impact de l'incertitude provenant de la variabilité spatiale du gisement sur la production d'uranium et de quantifier l'incertitude sur la production d'uranium. C'est-à-dire que l'on souhaite connaître la loi de probabilité de la production d'uranium au cours du temps connaissant le modèle géostatistique. Cette loi de probabilité de la production d'uranium est calculée à partir de la production d'uranium sur un échantillon de réalisations du modèle géostatistique. Diverses quantités peuvent être calculées à partir de cette approximation. Par exemple les déciles de l'histogramme de la production, le comportement moyen ou médian, le dépassement d'un seuil de production à un horizon de temps donné. Le calcul de ces valeurs représente ce que l'on nomme quantification d'incertitude.

La figure 4.1 illustre simplement la propagation de l'incertitude géologique en incertitude sur la production d'uranium à partir de N réalisations. On appelle propagation directe de l'incertitude le cas où l'on approxime la loi de probabilité de la production d'uranium à partir de l'ensemble des réalisations disponibles. Cette propagation directe d'incertitude a l'avantage de donner des résultats robustes. La figure 4.2, par exemple, présente les résultats de production d'uranium dans cent réalisations géostatistiques du gisement à l'échelle d'un bloc.

Il y a cependant une limite pratique à la mise en place de la propagation directe de l'incertitude dans une application industrielle. En effet, afin d'obtenir une approximation efficace de la loi de probabilité de la production d'uranium, il faut simuler cette production pour un grand nombre de réalisations. Cette limite vient de l'étape de simulation de l'exploitation d'uranium par transport réactif.

En raison de la taille des grilles de discrétisation des réalisations (centaines de milliers de mailles), de la complexité de la résolution du couplage de transport réactif, et du temps d'exploitation considéré (plusieurs années), le temps CPU de simulation de transport réactif est très important (environ une journée, pour un seul calcul parallélisé sur vingt coeurs). Cet important temps de calcul rend impossible la simulation de l'exploitation par ISR par transport réactif dans un grand nombre de réalisations en contexte industriel.

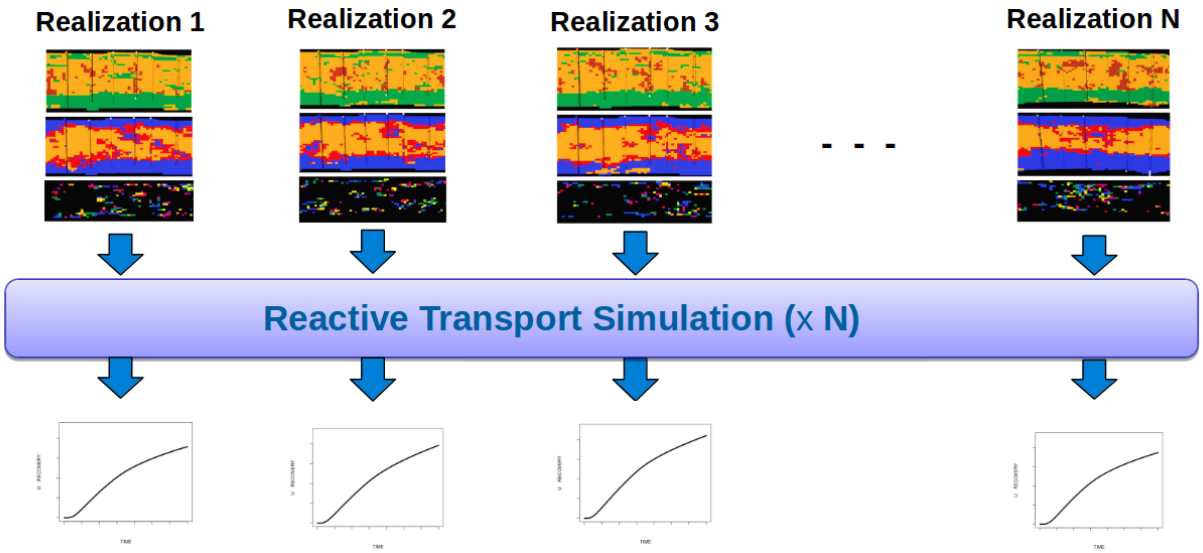

FIGURE 4.1 – *Schéma de propagation directe de l'incertitude géologique en incertitude dynamique. L'exploitation de l'uranium par ISR est simulée dans chacune des N réalisations géostatistiques*

4.2 Propagation parcimonieuse de l'incertitude géologique

Le principe de la propagation parcimonieuse de l'incertitude consiste à simuler l'ISR dans un sous-ensemble de réalisations pour pouvoir l'effectuer dans un temps raisonnable. Quelques réalisations sont judicieusement choisies de manière à conserver une bonne représentation des statistiques permettant la caractérisation de l'incertitude, à savoir la médiane et les premiers et dixième déciles. L'équilibre entre le temps de calcul autorisé, i.e. le choix du nombre de simulations de transport réactif, et la qualité de l'approximation est au coeur de la problématique.

Cette méthode fut tout d'abord proposée par Scheidt et al. [2009] sous le nom de réduction de scénarios, puis fut largement répandue dans différents contextes des géosciences, tels que : l'exploitation pétrolière ([Arnold et al., 2016], [Shirangi and Durlofsky, 2016], [Rahim and Li, 2015] ou [Bardy et al., 2019] par exemple), l'hydrogéologie ([Josset et al., 2015]) ou le stockage de CO_2 ([Bouquet et al., 2013]).

Toutes ces méthodes présentent une approche similaire pouvant se décomposer comme suit :

- *la description de chacune des réalisations indépendamment les unes des autres ;*
- *la quantification des dissimilarités entre les réalisations à l'aide d'une distance basée sur leur description ;*
- *la sélection des m réalisations représentatives de l'ensemble N et leur pondération en fonction de la matrice de distance des réalisations ;*
- *la propagation et quantification de l'incertitude à partir des m réalisations sélectionnées.*

4.2.1 Description des réalisations

La première phase de la réduction de scénarios est la phase de description. La propagation parcimonieuse d'incertitude repose sur la capacité à choisir judicieusement un petit nombre de réalisations parmi un plus grand ensemble. Il est donc nécessaire de construire un critère permettant de discriminer les réalisations les unes par rapport aux autres. Le calcul de ce critère se fait via une fonction de description, appelée proxy, qui est appliquée à chaque réalisation. L'objectif de cette fonction de description est de permettre une discrimination des réalisations similaire à celle offerte par les courbes de production d'uranium. Cette fonction peut prendre de nombreuses formes telle que le calcul du tonnage en uranium de la réalisation (proxy sur les propriétés statiques) ou la simulation d'écoulement et de récupération de traceurs au travers du réservoir. Un descripteur peut être un scalaire extrait des résultats du proxy, une courbe, ou un histogramme. Le tonnage d'uranium dans

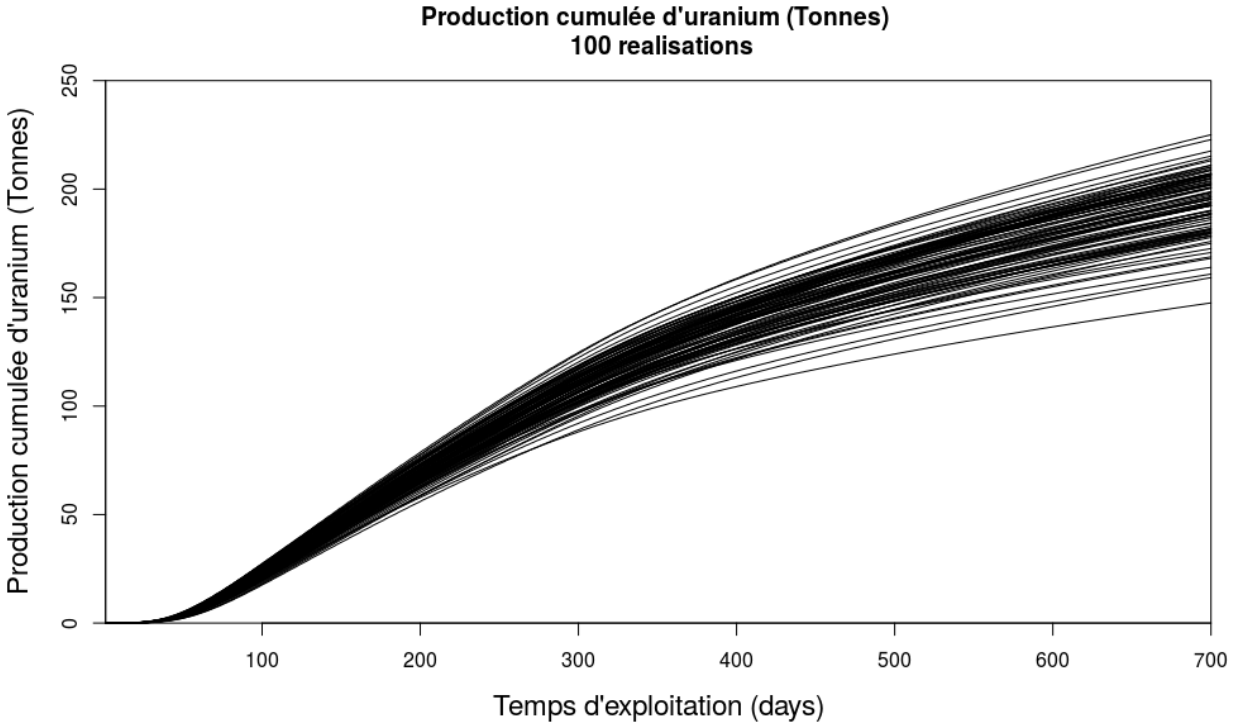

FIGURE 4.2 – *Variabilité des résultats de simulation d'ISR pour cent réalisations. L'incertitude représentée par ces résultats pourra être représentée et quantifiée afin d'évaluer l'impact de la propagation de l'incertitude sur les propriétés géologiques.*

une réalisation ou la production d'un traceur à une date donnée sont deux exemples de descripteurs. Les chapitres 6, 7 et 8 de cette thèse présente diverses fonctions descriptives des réalisations et les descripteurs associés.

Cette étape est critique puisqu'elle permet de discriminer les réalisations les unes par rapport aux autres et c'est sur cette discrimination que va se baser la sélection des réalisations. L'objectif est de sélectionner les réalisations en se basant sur leur description de façon à échantillonner la variabilité de leurs résultats de production. De plus, une contrainte portant sur cette description est qu'elle doit être significativement plus rapide à calculer que la simulation ISR-U.

Parmi toutes les applications de la réduction de scénarios, de nombreux proxys ont été développés. Certains se basent sur les propriétés statiques des réservoirs (*e.g.* Rongier [2016], Bardy and Biver [2014]), comme la connectivité des réservoirs, ou les ressources pétrolières. D'autres, en revanche, décrivent les propriétés dynamiques des réalisations et nécessitent donc d'approximer l'écoulement. La récupération de traceur ou le calcul de saturation en eau le long de lignes de courant furent des proxys très étudiés dans l'industrie pétrolière et gazière (*e.g.* Crane and Blunt [1999], Caers [2003], Yin et al. [2011]).

4.2.2 Calcul de distance entre les réalisations

Le type de distance choisi dépend du résultat de la phase de description : par exemple la distance de Hausdorff dans le cas de courbes (plus grand écart entre deux courbes), Huttenlocher et al. [1993], la distance de Jensen-Shannon pour discriminer deux histogrammes, décrite entre autres dans la revue de Cha [2007], ou la distance euclidienne dans le cas de deux points. Afin de limiter la complexité du travail, la distance entre les réalisations est faite à partir de la distance euclidienne.

À la fin de la phase de description et pour chaque réalisation, un vecteur de quelques descripteurs est extrait des résultats proxys. Cette description va permettre de différencier les réalisations à l'aide de ces quelques scalaires. On peut considérer chaque vecteur de descripteurs comme le vecteur des coordonnées de la réalisation dans l'espace des descripteurs. Ainsi la dissimilarité entre les réalisations

peut être calculée comme la distance euclidienne entre les réalisations. Les descripteurs sont centrés et réduits afin de ne pas créer de pondération artificielle provenant de leurs différences d'amplitude de valeurs. Lors du calcul de la dissimilarité, il peut être possible de pondérer chaque descripteur.Cette éventuelle pondération entraîne cependant une importante complexification de la paramétrisation de la réduction de scénarios en augmentant considérablement le nombre de paramètres à ajuster dans l'approche.

En fonction des proxys utilisés, l'espace des descripteurs décrivant les réalisations peut être relativement grand. Ainsi, il est courant d'utiliser l'algorithme de Multi-Dimensionnal Scaling (MDS), décrit par Cox and Cox [2000], afin de réduire l'espace des descripteurs à un espace plus petit synthétisant les informations contenues dans le nuage de points représentant les réalisations. De plus, la diminution de la dimension de l'espace facilite grandement la visualisation des résultats.

Dans certains exemples de réduction de scénarios ([Scheidt and Caers, 2009]), il est possible de regrouper les réalisations dans un espace non euclidien grâce à une transformation par noyau. Ceci permet de linéariser les données dans le nouvel espace, et facilite donc la classification des réalisations ([Shawe-Taylor et al., 2004]). Les données de cette thèse n'ayant pas de structures particulières à linéariser, l'utilisation de noyaux n'améliore pas les résultats.

4.2.3 Clustering, sélection et pondération des réalisations

La propagation parcimonieuse d'incertitude se base sur le choix d'un petit nombre de réalisations pour représenter un plus grand ensemble. Dans ce but, on utilisera des algorithmes de classification non-supervisée sur l'ensemble des réalisations permettant de les regrouper en familles (i.e. clusters). L'algorithme utilisé permet de déterminer une réalisation représentative par famille.

Différents algorithmes de clustering peuvent être utilisés. Les deux plus classiques sont : les k-means, comme utilisés par Scheidt and Caers [2009], ou les k-médoïdes, comme utilisés par Bardy et al. [2019]. Chacun de ces algorithmes classifiera l'ensemble des N réalisations en k clusters. La différence entre ces deux algorithmes vient du point de référence de chaque cluster autour duquel va converger la classification. Ces différences sont détaillées par Kaufman and Rousseeuw [1990]. L'algorithme des k-means va itérativement minimiser la variance intra-cluster. L'algorithme des k-médoïdes, quant à lui, fonctionne sur un principe similaire, mais en minimisant une fonction de coût entre la réalisation la plus proche du barycentre du cluster et les réalisations du cluster. Les principes algorithmiques des deux classifications sont présentés ici :

- *k-means :*
  1. *Initialisation* Placement aléatoire de k points comme barycentres des k clusters ;
  2. Tant qu'il n'y a pas convergence de la classification :
     a. Association de chaque réalisation au cluster dont le barycentre est le plus proche ;
     b. Calcul du nouveau barycentre de chaque cluster avec les modifications de l'étape précédente ;
     c. Si le critère de convergence est atteint, arrêter l'algorithme.

- *k-médoïdes :*
  1. *Initialisation :* Sélection aléatoire de k réalisations comme médoïdes des clusters ;
  2. Tant qu'il n'y a pas convergence de la classification :
     a. Association de chaque réalisation au cluster dont le médoïde est le plus proche ;
     b. Calcul du nouveau barycentre de chaque cluster à partir des modifications de l'étape précédente ;
     c. Calcul du nouveau médoïde de chaque cluster comme la réalisation la plus proche du nouveau barycentre ;
     c. Si le critère de convergence est atteint, arrêter l'algorithme.

Notre objectif étant d'obtenir pour chaque famille une réalisation avec laquelle modéliser l'ISR, il est plus cohérent d'utiliser la méthode des k-médoïdes, qui fait converger l'algorithme autour de réalisations et non de barycentres de clusters abstraits. Cependant, tous ces médoïdes n'ont pas le

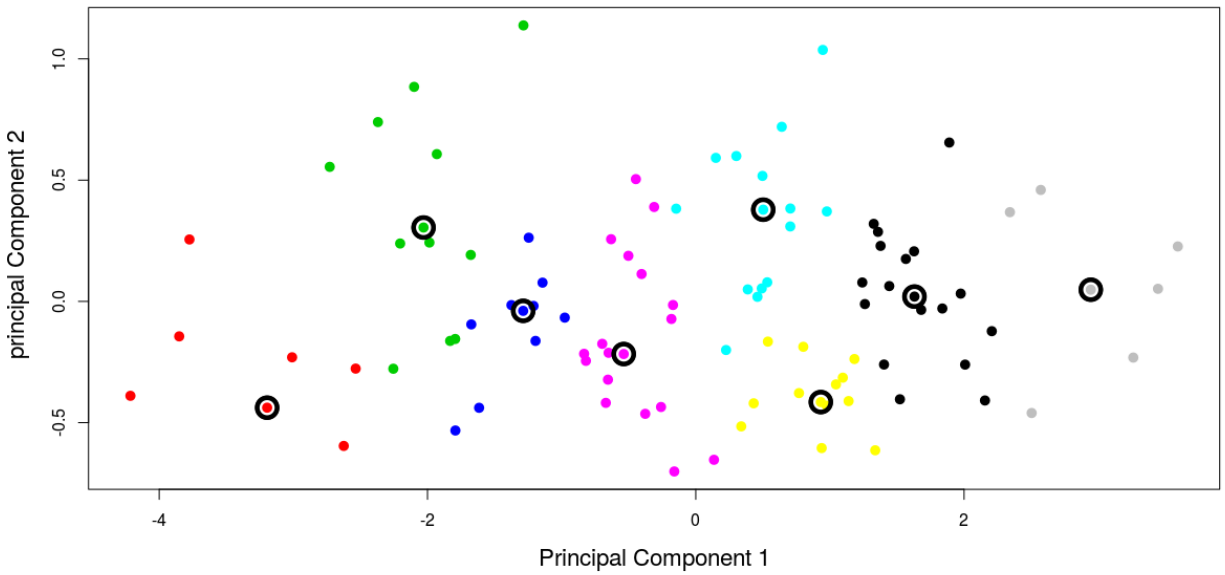

FIGURE 4.3 – *Exemple de résultat de l'algorithme des k-médoïdes pour $k = 8$. Les axes sont définis par les deux premières composantes principales de l'espace réduit des descripteurs. Chaque point correspond à une réalisation, chaque couleur à une famille de la classification, et chaque réalisation entourée, à la réalisation représentative de sa famille (le médoïde)*

même poids statistique. Afin de pondérer chaque médoïde, on lui associera donc un poids égal à la proportion de réalisations classées dans sa famille. La figure 4.3 présente un exemple de résultat de k-médoïdes pour $k = 8$ sur cent réalisations d'un bloc de production.

Le choix du nombre de médoïdes est déterminé pour équilibrer la volonté d'avoir un résultat rapide, en limitant le nombre de simulations de transport réactif à effectuer, et la volonté d'avoir une approximation efficace de l'incertitude sur la production d'uranium. La limitation du nombre de simulations de l'ISR sera donné par les capacité de calcul disponible et par les spécificités du projet impliqué. L'estimation de la qualité du partitionnement, quant à elle peut s'évaluer à l'aide d'un outil développé par [Rousseeuw, 1987] : le coefficient de silhouette d'un clustering. Le coefficient de sihouette d'un clustering évalue l'éclatement des réalisations de chaque famille. Plus la valeur de la silhouette est élevée, plus les réalisations de chaque famille sont regroupées autour du médoïde, et donc plus le clustering est de bonne qualité.

4.2.4 Quantification des incertitudes

Une fois la classification effectuée, les k réalisations et leur pondération sont obtenues. La simulation de l'exploitation de l'uranium par ISR peut désormais être faite dans chacune des réalisations. De par la nature de la description et de la sélection, les résultats de production observés échantillonnent la variabilité de l'ensemble de départ, comme le montre le premier graphique de la figure 4.4.

Avec les courbes de production des réalisations sélectionnées et leur pondération, il est possible d'approximer la loi de probabilité de la production d'uranium par la distribution discrète de ces quelques courbes. Ainsi, à chaque pas de temps, on peut sélectionner la valeur de production *prod* parmi les réalisations, telle que la probabilité P d'être inférieur à cette *prod* soit de $x\%$: $\mathrm{P}(prod) < x$. Cette méthode permet de calculer les classiques courbes de productions P_{10}, P_{50} et P_{90} où x est égal à 0.10, 0.50 et 0.90 respectivement. Ces courbes sont construites à chaque pas de temps et sont présentées sur le deuxième graphique de la figure 4.4

Notons qu'il y a effectivement une perte d'information, entre l'ensemble de départ où le nombre de réalisations peut être très grand, mais que la réduction de scénarios (Scheidt and Caers [2009])

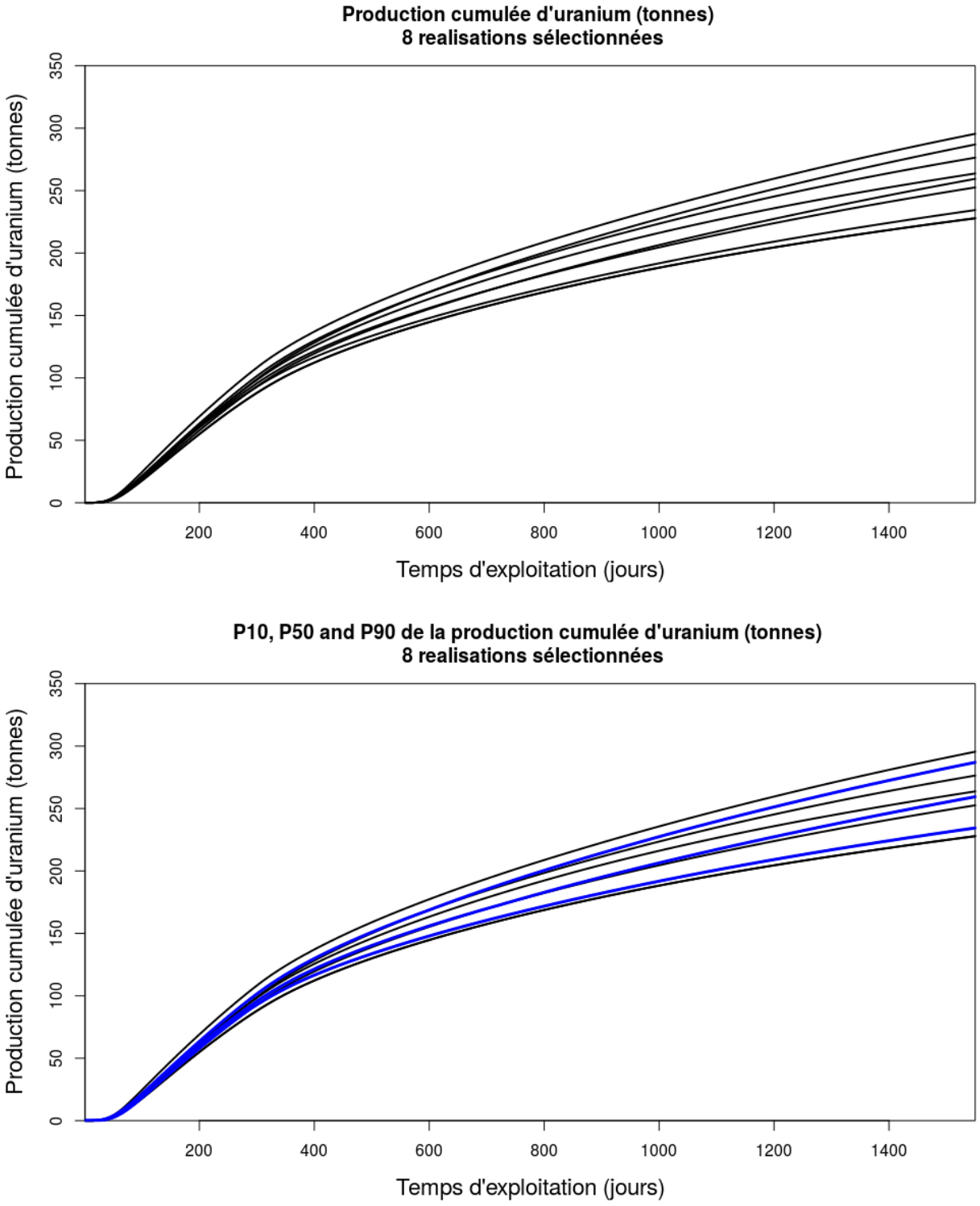

FIGURE 4.4 – *Exemple de variabilité des résultats de simulation d'ISR pour un petit nombre de réalisations et quantification de l'incertitude des courbes. La simulation de l'ISR de l'uranium par transport réactif est effectuée uniquement dans les k réalisations sélectionnées. Il est possible de quantifier l'incertitude grâce à ces k réalisations en utilisant les valeurs de production à chaque pas de temps et la pondération des réalisations.*

est censée minimiser cette perte vis-à-vis de la variabilité sur les résultats de simulations.

Deuxième partie

Quantification d'incertitude à l'aide de proxys numériques

Introduction - Partie 2

Les chapitres précédents ont permis de décrire le contexte à la fois scientifique et industriel dans lequel les travaux de la thèse se situent. L'objectif est désormais de montrer la contribution des travaux effectués dans la quantification d'incertitude sur la production d'uranium. La simulation de l'ISR nécessite trois sources de données : les propriétés géologiques du gisement, le scénario d'exploitation, et le modèle géochimique. La propagation d'incertitude présentée se limite à la propagation de l'incertitude aléatoire des propriétés géologiques en incertitudes sur la production, à l'aide d'un ensemble de réalisations. L'incertitude sur les paramètres de modélisation des propriétés géologiques, sur le scénarios d'exploitation et sur les paramètres géochimiques font l'objet d'une discussion à la fin du présent manuscrit.

Le premier chapitre de cette partie présente la propagation directe d'incertitude pour deux blocs de production. Les propriétés géologiques de chaque blocs sont représentées par cent réalisations conditionnées aux d'exploration et de développement. L'exploitation de l'uranium est simulée sur chaque réalisation durant 1550 jours. Cela permet d'obtenir pour les deux blocs une évaluation de l'incertitude sur la production d'uranium et de quantifier cette incertitude. La quantification d'incertitude de production par propagation directe sert de référence pour comparer les résultats obtenus par réduction de scénarios dans les chapitre suivant. Cependant, calculer en parallèle sur 24 coeurs ces cent résultats d'exploitation pour les deux blocs a pris en cumulé respectivement 2330 heures (97 jours) et 1380 heures (57.5 jours). Si ces temps de calcul sont exceptionnellement tolérables en contexte de recherche, il ne le sont plus en contexte opérationnel, et justifient l'utilisation de la propagation parcimonieuse d'incertitude.

La propagation parcimonieuse d'incertitude repose sur la réduction de scénarios telle que développée par Scheidt and Caers [2009]. On va adapter leur méthode à notre problème. La réduction de scénarios repose sur l'utilisation de proxys des simulations ISR. Les résultats des proxys sur chaque réalisation sont utilisés pour reproduire la dissimilarité entre les productions d'uranium des réalisations. La matrice de distance permet d'extraire un faible nombre de réalisations représentatives dans lesquelles est simulée l'exploitation par ISR. On obtient une approximation de l'incertitude de production. La qualité de l'approximation dépend fortement de la description des réalisations faite par le proxy. Ainsi, afin d'évaluer la qualité des proxys développés au cours de la thèse, on comparera le résultat de quantification d'incertitude obtenue par réduction de scénarios avec la quantification d'incertitude de la propagation directe.

Le chapitre 6 présente l'utilisation de proxys calculant des quantités scalaires sur les propriétés géologiques. Cependant ceux-ci ne prennent pas en compte le comportement dynamique de l'exploitation et ne reproduisent pas suffisamment la dissimilarité entre les réalisations pour effectuer une réduction de scénarios efficace. Le chapitre 7 introduit des simulations d'écoulement et de transport de traceurs. La récupération des traceurs est utilisée comme proxy de la récupération de l'uranium. L'utilisation conjointe des proxys statiques et de la récupération des traceurs dissous comme descripteurs dans la réduction de scénarios est évaluée. Cependant, ils ne représentent pas les phénomènes de dissolution dans la lixiviation, et ne permettent pas d'approximer correctement la quantification d'incertitude de référence. Le chapitre 8 présente enfin la comparaison de deux proxys différents. Chacun repose sur la dissolution contrôlée d'un traceur minéral artificiel. Il s'avère que la récupération du traceur minéral sous contrôle cinétique est un proxy permettant de reproduire efficacement la dissimilarité entre les réalisations. Il en résulte une réduction de scénarios efficace et robuste pour approximer la quantification d'incertitude de référence.

Le plan minier définit un scénario d'exploitation de l'ensemble de la mine en respectant les contraintes hydrauliques du réseau de transport de fluide et des usines, et permet de s'assurer de l'atteinte de l'objectif annuel de production d'uranium. Un des paramètres d'entrée du calcul du plan minier est la prévision de production des blocs de production de la mine. Le chapitre 9 présente plusieurs cas d'application de propagation de l'incertitude de production des blocs de production dans un modèle approché de calcul de plan minier. L'incertitude des blocs utilisés est estimée par réduction de scénarios avec la méthodologie développé dans les chapitres le précédent. Les résultats montrent le fort impact de l'incertitude de production à l'échelle du bloc de production sur le calcul

des dates d'ouverture et de fermeture des blocs de production. Ils soulignent l'intérêt de prendre en compte la propagation d'incertitude dans le calcul du plan minier opérationnel.

Le chapitre 10, quant lui, décrit les travaux exploratoires menés sur l'utilisation de méta-modèles du code de résolution de la spéciation chimique dans les simulations de transport réactif. En effet, au cours d'une simulation de transport réactif, une importante partie du temps de calcul est dédiée à la résolution de la chimie. La résolution est calculée de façon indépendante plusieurs fois dans chaque voxel à chaque pas de temps, et l'on retrouve de nombreuses résolutions pour des paramètres d'entrée fortement similaires, voir égaux. Ces raisons nous ont amené à explorer l'utilisation d'algorithme d'apprentissage statistique pour résoudre la chimie. Les résultats, leur interprétation et les perspectives sont présentées dans le chapitre 10.

Chapitre 5

Propagation directe d'incertitude en ISR

5.1 Modélisation du roll front dans deux blocs de production

Deux blocs de production sont utilisés lors de la construction de la méthodologie de la réduction de scénarios, lors du développement des proxys et lors du choix des descripteurs. Le choix des blocs et leur utilisation correspond à un objectif précis : tester la robustesse et la reproductibilité de la méthode sur des blocs à géologie complexe. Pour cela, le premier bloc est utilisé afin de choisir la combinaison de descripteurs permettant de sélectionner au mieux le sous-ensemble de réalisations pour approximer la loi de probabilité de la production d'uranium. Le deuxième bloc sert à tester la robustesse du choix des descripteurs utilisés en quantifiant la qualité de la réduction de scénarios.

5.1.1 Présentation du bloc de production PB01

Géologie du bloc

Le premier bloc utilisé lors de la mise en place de la méthode de réduction de scénarios est le bloc nommé PB01 dont la disposition des puits injecteurs et producteurs est présentée figure 5.1. La figure 5.2 montre trois coupes géologiques verticales du bloc de production. Ce sont des coupes transversales du roll front, et sont de même orientation que sur le schéma 1.2. On observe sur ces coupes la géométrie complexe de la minéralisation qui pourra être divisée par des lentilles argileuses imperméables ou bien étagée en plusieurs niveaux. La minéralisation n'est pas clairement située au niveau du toit ou du mur du réservoir, mais située à une altitude non uniforme. On dit que la minéralisation est mixte, au contraire d'une minéralisation dite perchée, ou basale. La complexité particulière de la minéralisation mixte est un atout pour le développement de la méthode puisqu'elle permet de développer des proxys robustes face à une géologie complexe.

Géométrie du champ de puits

La géométrie de cette minéralisation impacte directement le positionnement horizontal des puits d'injections et de productions et la position verticale des crépines. Ces coupes qui ont servi précédemment à montrer l'hétérogénéité de la géologie ont été dessinées à partir des données de forages des phases d'exploration, de développement, et technologique dans le but de positionner les crépines des puits injecteurs et producteurs. La construction de la géométrie du champ de puits au-dessus des zones minéralisées, avec parfois la création de cellules de production superposées, et le positionnement des crépines sont effectués d'après les 3 phases de récupération de données de forages. Trois cas différents sont à distinguer dans le choix de construction de cellules superposées. Ceux-ci sont présents dans le bloc PB01 et illustrés figure 5.2. Tout d'abord, la coupe 5.2-***a)*** présente le cas où une lentille d'argiles imperméables sépare un volume de minéralisation supérieure d'une zone inférieure. Dans ce cas, il y a nécessité de mettre en place une cellule de production supérieure et une cellule de production inférieure afin que la totalité de la minéralisation soit bien lixiviée. Le deuxième cas nécessitant la superposition de cellules de production correspond au cas où la minéralisation est particulièrement épaisse. En effet, la longueur des crépines étant limitée, il sera nécessaire

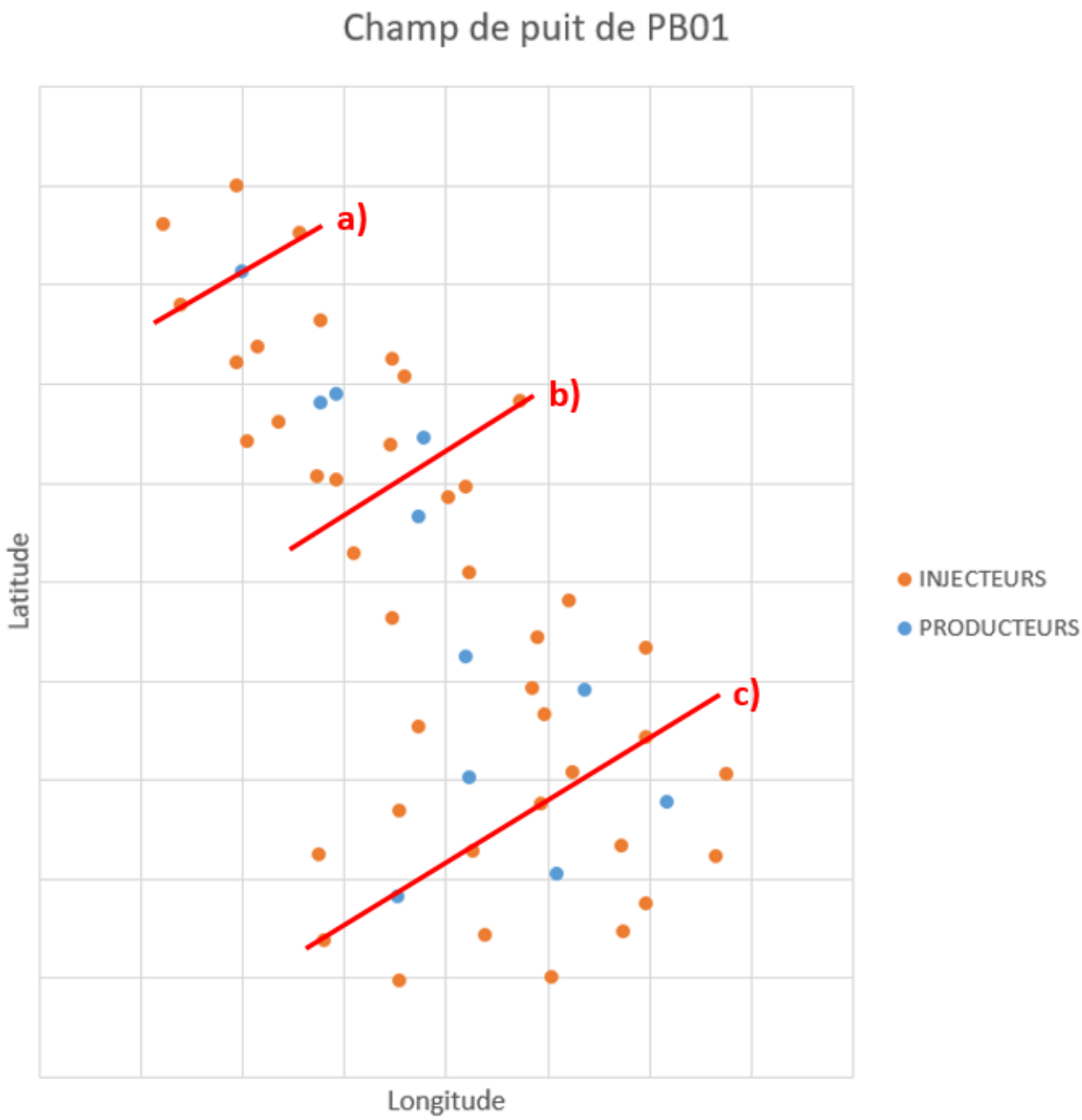

FIGURE 5.1 – *Carte du champ de puits du bloc de production PB01. Les traits rouges sont les tracés des coupes géologiques de la figure 5.2*

de doubler les cellules ayant une minéralisation de trop forte puissance, comme le montre la figure 5.2-***b)***. Le troisième et dernier cas demandant la superposition de cellules de production est celui où une importante zone stérile sépare une zone supérieure et inférieure de minéralisation. Ceci permet d'éviter le pompage par des puits producteurs de l'eau stérile, qu'elle provienne de l'aquifère ou soit injectée. Ceci est montré sur la coupe 5.2-***c)***.

La géométrie des puits du bloc PB01 et la position de leurs crépines sont des paramètres d'entrée des simulations de l'ISR. Ce bloc est composé de 41 puits injecteurs et de 11 producteurs. Les cellules de productions se répartissent sur deux niveaux.

De même que pour la géologie, la complexité de ce champ de puits est intéressante pour développer une méthode de réduction de scénarios robuste.

Modélisation stochastique du bloc PB01

La modélisation de cette zone est effectuée à l'aide de la méthode présentée dans la partie stochastique du chapitre II. Les données permettant d'inférer les paramètres des modèles proviennent de 140 puits des phases d'exploration et de développement. Le domaine de modélisation est beaucoup

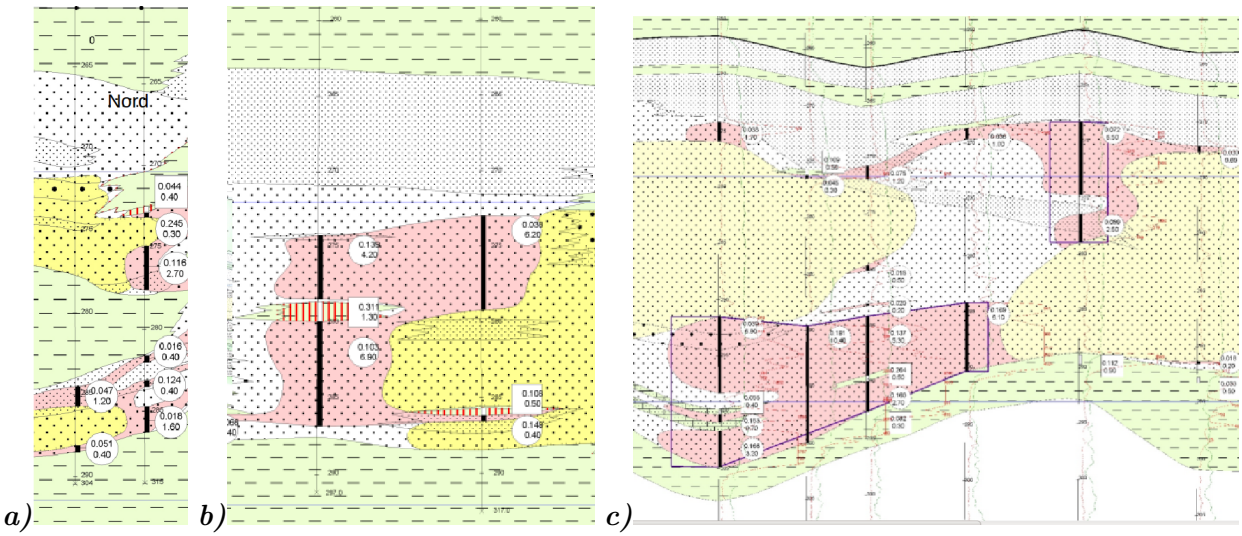

FIGURE 5.2 – *Trois coupes géologiques verticales parallèles du bloc de production PB01 présentant la lithologie et la minéralisation. Le vert correspond aux argiles imperméables, Le jaune et le blanc aux sables perméables, et enfin le rouge au minerai riche en uranium. Coupes provenant de Katco.*

plus large que le bloc de production PB01 puisqu'il l'englobe, ainsi que les trois blocs adjacents. Le domaine est ensuite réduit autour du bloc PB01 pour effectuer les simulations ISR-U.

Les données des forages de la phase technologique sont obtenues tardivement dans le processus de mise en exploitation d'un bloc, et conditionnent fortement les réalisations mises à jour avec les nouvelles données. L'incertitude sur la répartition spatiale des propriétés est donc fortement diminuée. L'impact de l'utilisation des données supplémentaires des puits technologiques pour conditionner les réalisations sur l'incertitude de production est étudié dans la dernière section du chapitre.

Les proportions globales du lithotype des données sont :

- Faciès imperméable : 28.5%
- Sable : 61.8%
- Sable grossier : 9.7%

Les proportions globales du faciès OMR sont :

- Oxydé 27.7%
- Minéralisé : 17.6%
- Réduit : 54.7%

Ces modèles permettent de calculer un grand nombre de simulations des trois propriétés. Dans notre cas, chaque propriété est simulée cent fois. Afin d'avoir un nombre suffisamment restreint de réalisations pour simuler le transport réactif dans chacune d'entre elles, nous utilisons un jeu de cent réalisations. On fait l'hypothèse que la variabilité de la production d'uranium obtenue avec ces cent réalisations est représentative de la loi de probabilité sur la production d'uranium sous-jacente.

Les réalisations de PB01 sont générées sur une grille régulière de 295000 voxels de taille 5mx5mx1m. La figure 5.3 montre plusieurs coupes d'une même réalisation pour chacune des trois propriétés.

5.1.2 Présentation du bloc de production PB02

Le deuxième bloc utilisé durant le développement de la méthode est le bloc nommé PB02. Ce bloc est choisi dans le but de valider la réduction de scénarios et les différents proxys construits. Ainsi, différents critères nous permettent de dire qu'il est un bon candidat pour assurer la reproductibilité de la méthode sur d'autres blocs de production. Les différents critères portent sur la complexité de sa géologie, la différence de géométrie du champ de puits avec PB01, et les différences de la grille de discrétisation du domaine pour les simulations stochastiques.

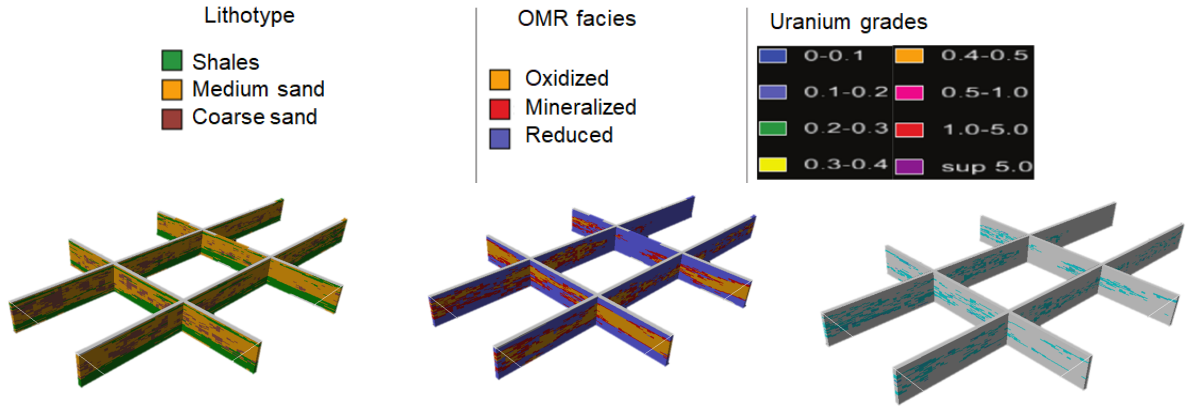

FIGURE 5.3 – *Coupes verticales d'une réalisation du bloc de production PB01. La répartition spatiale des propriétés est différente pour chacune des réalisations. Elles sont cependant toutes conditionnées aux puits d'exploration et de développement*

Géologie du bloc

Tout d'abord, la figure 5.4 montre trois coupes géologiques verticales du bloc de production. Ces coupes sont parallèles entre elles et sont transversales au roll front, de même que sur le schéma 1.2. Ces coupes sont aussi construites à partir des données des puits des trois phases de forages. Tout comme pour PB01, la géométrie de la minéralisation est complexe, non limitée à un seul étage du réservoir, discontinue, et incorporant des lentilles d'argiles imperméables. Cependant, la comparaison des coupes géologiques entre les deux blocs montre plus de lentilles argileuses dans le réservoir de PB02. La perméabilité semble plus hétérogène dans ce bloc. La complexité de la minéralisation de ce bloc de validation en fait donc un bon candidat pour vérifier la reproductibilité de la méthode sur d'autres blocs de production.

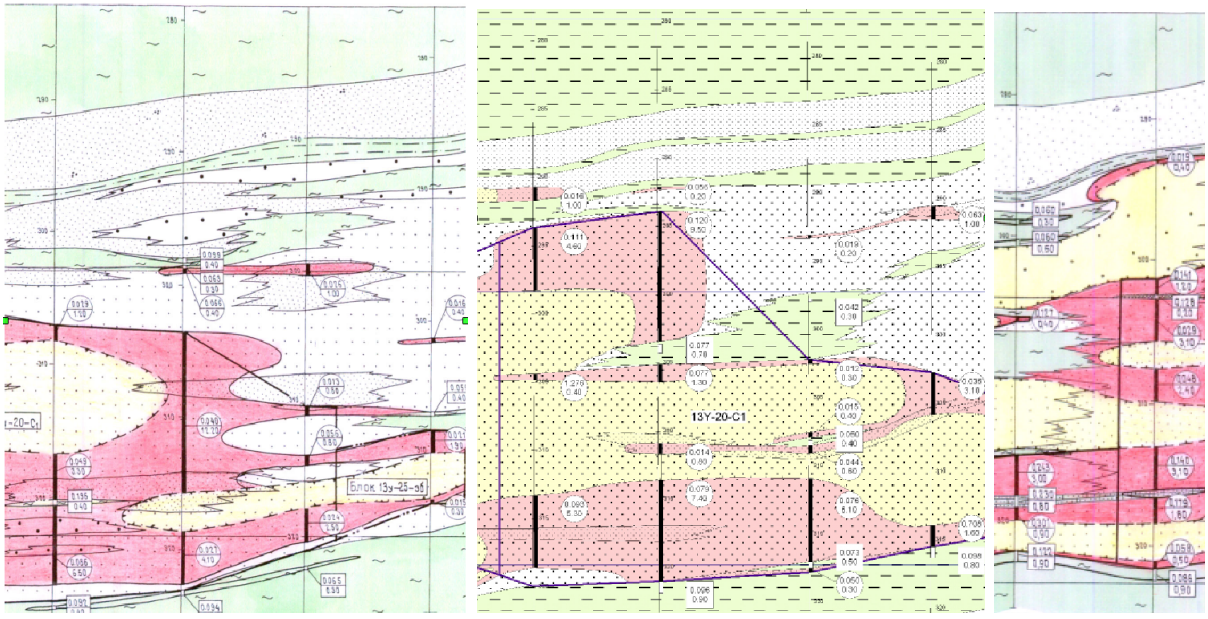

FIGURE 5.4 – *Trois coupes verticales parallèles de PB02 montrant le lithotype et la minéralisation. Le vert correspond aux argiles imperméables, Le jaune et le blanc aux sables perméables, et enfin le rouge au minerai riche en uranium. Coupes provenant de Katco. Les traits de coupes sont tracés sur la figure 5.5*

Géométrie du champ de puits

Le champ de puits du bloc PB02 est composé de 48 puits injecteurs et de 13 puits producteurs. De même que pour le bloc PB01, la minéralisation de l'uranium sous le bloc PB02 a parfois nécessité de superposer des cellules de production. La disposition des puits injecteurs et producteurs est présentée figure 5.5.

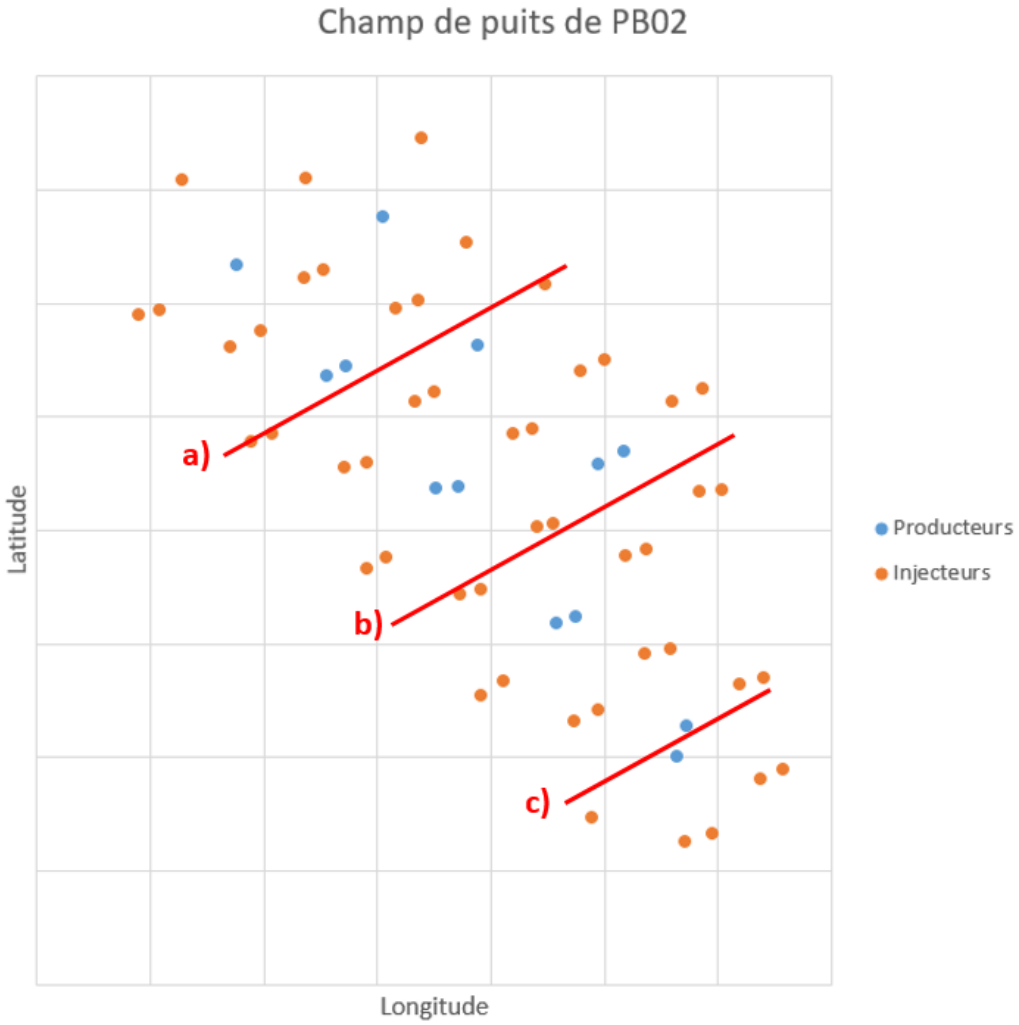

FIGURE 5.5 – *Carte du champ de puits du bloc de production PB02. Les traits rouges représentent les tracés des coupes géologiques de la figure 5.4*

Une importante différence entre les puits de PB01 et de PB02 provient de la répartition des cellules de production les unes par rapport aux autres. Alors que les cellules de production de PB01 sont relativement alignées, celles de PB02 sont disposées de façon plus compacte. Le choix de la géométrie du champ de puits par les opérateurs est guidé par la géométrie de la minéralisation. Ainsi, dans ce deuxième cas de figure, les échanges de fluides entre cellules de production seront plus importants que dans le premier bloc. Tester les proxys et la réduction de scénarios dans un bloc plus impacté par ces échanges permet d'attester de la robustesse des résultats obtenus par les outils développés.

Modélisation stochastique du bloc PB02

Comme pour le bloc précédent, les simulations géostatistiques des propriétés de PB02 sont effectuées à l'aide des modèles présentés dans le chapitre 2. Les données utilisées pour ces modèles viennent de 107 sondages des phases d'exploration et de développement. Les simulations sont calculées sur un grand domaine englobant PB02 et les blocs adjacents. Comme pour PB01, les simulations

de transport réactif seront effectuées dans un domaine réduit centré autour de PB02. Le support de discrétisations des réalisations de PB02 est différent de celui de PB01. Il s'agit du deuxième support historiquement utilisé. C'est une grille régulière de 10mx10mx1m. La réalisation centrée autour de PB02 comporte 185 000 voxels.

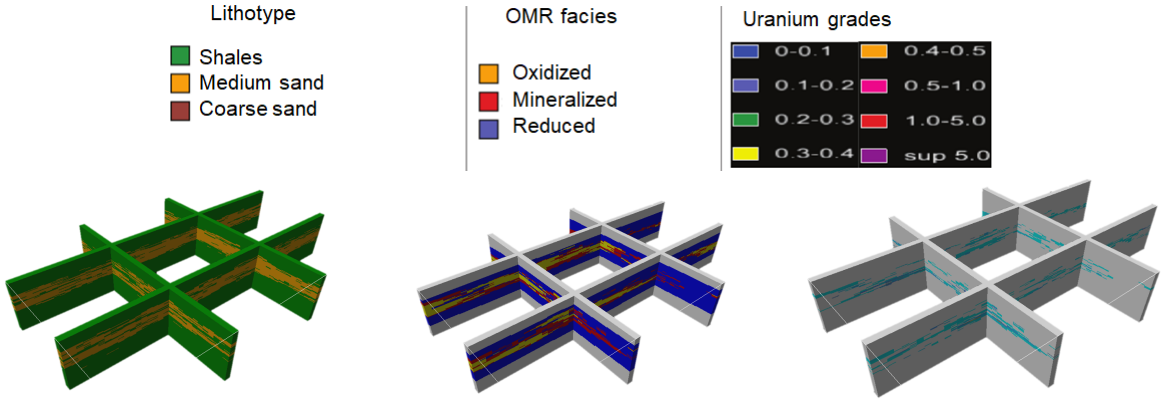

FIGURE 5.6 – *Coupes verticales d'une réalisation du bloc de production PB02. La répartition spatiale des propriétés est différente pour chacune des réalisations*

Les proportions globales du lithotype des données de puits sont :
- Faciès imperméable : 52%
- Sable : 21%
- Sable grossier : 27%

Les proportions globales du faciès OMR sont :
- Oxydé 22%
- Minéralisé : 16%
- Réduit : 62%

Chaque propriété est simulée cent fois. De même que pour le bloc PB01, cent réalisations vont servir de base pour échantillonner la variabilité de la géologie du bloc PB02. On fait l'hypothèse que la variabilité de la production d'uranium obtenue avec ces cent réalisations est représentative de la loi de probabilité de la production d'uranium sous-jacente. La figure 5.6 montre plusieurs coupes d'une même réalisation pour chacune des trois propriétés.

5.1.3 Comparaison des deux blocs

Le choix de prendre deux blocs de production avec une géométrie de minéralisation complexe vient de la volonté de construire une méthode de réduction de scénarios et des proxys capable d'être utilisée avec des géométries diverses. La paramétrisation et la validation sur ces deux blocs permettent de faire l'hypothèse que la méthode reste utilisable pour des géologies plus simples.

De même ces deux blocs présentent un champ de puits complexe avec certaines cellules de production superposées. Il est intéressant de travailler sur ces deux champs de puits afin de valider la méthode dans des cas difficiles. De plus, leurs différences par rapport à la compacité de la répartition des cellules de production permettent d'élargir la diversité des blocs de la réduction de scénarios testée lors de cette thèse.

Le bloc PB02 possède une différence importante avec le PB01. Il s'agit du support de modélisation. En effet, deux discrétisations différentes sont historiquement utilisées chez Katco et Orano Mining, les grilles régulières 5mx5mx1m et 10mx10mx1m. Il est important de valider la réduction de scénarios à la fois sur le support à la discrétisation fine et sur le support à la discrétisation plus grossière afin de s'assurer que l'utilisation de la méthode sur d'autres blocs donne des résultats cohérents.

5.2 Présentation des simulations de l'ISR de PB01 et PB02

5.2.1 Hypothèses paramétriques des simulations de l'ISR

Paramètres géochimiques

Les modèles géochimiques pour chacun des blocs sont construits à partir de trois sources. Ces données proviennent de différentes études et essais en laboratoire effectués antérieurement, (Robin et al. [2016], [Simon et al., 2014]), de l'expérience des opérateurs et ingénieurs miniers, et de l'ajustement des paramètres de simulation aux mesures de production réelles (Regnault et al. [2015]). Ces modèles sont ajustés par rapport à la balance des ions Fer(III) aux puits, la production d'uranium, et l'évolution du pH. Cependant, dans le cadre de cette thèse, nous nous plaçons dans le cas où la production n'a pas encore débuté, les paramètres ne sont pas ajustés à la production réelle. Les tableaux 5.1 et 5.2 donnent la composition minéralogique de chacun des blocs PB01 et PB02.

Minéral	Oxydé (mol/kg)	Minéralisé (mol/kg)	Réduit (mol/kg)
Quartz (Cristobalite-α)	117	117	117
Smectite (Beidellite Fe)	0.1	0.1	0.1
Kaolinite	0.5	0.5	0.5
Calcite	0.003	0.03	0.003
Goethite	0.007	0	0
Uraninite	0	**Variable**	0

TABLE 5.1 – *Modèle minéralogique par faciès dans le bloc de production PB01. La concentration en uraninite est donnée par les réalisations géostatistiques*

Minéral	Oxydé (mol/kg)	Minéralisé (mol/kg)	Réduit (mol/kg)
Quartz (Cristobalite-α)	112	112	112
Smectite (Beidellite Fe)	1	1	1
Kaolinite	0.5	0.5	0.5
Calcite	0.07	0.7	0.07
Goethite	0.01	0	0
Uraninite	0	**Variable**	0

TABLE 5.2 – *Modèle minéralogique par faciès dans le bloc de production PB02. La concentration en uraninite est donnée par les réalisations*

Les paramètres thermodynamiques associés à chaque espèce chimique du gisement sont présentés dans les tableaux 5.3 et 5.4. Dans le bloc PB01, la calcite est considérée comme étant à l'équilibre thermodynamique, sa dissolution est instantanée et ne dépend que de sa constante de réaction et de la concentration des réactifs. Dans le bloc PB02 sa dissolution n'est pas instantanée (cf Tableau 5.2.

D'après les analyses hydrogéochimiques des eaux de l'aquifère, le pH est choisi constant dans l'ensemble du réservoir quels que soient les faciès géochimiques et est égal à 8. Le potentiel d'oxydoréduction quant à lui diffère que l'on soit dans le faciès oxydé (Eh = 100 mV) ou dans le faciès minéralisé et réduit (Eh = -182 mV). Ces valeurs sont partagées par les deux blocs de production.

Minéral	Surface spécifique des minéraux (cm^2/g)	Constante cinétique de réaction - $Log_{10}k$ ($mol/m^2/s$)	Effet catalyseur
Quartz (Cristobalite-α)	2000	$\pm 2 \times 10^{-14}$	-
Smectite (Beidellite Fe)	6×10^6	$\pm 1.2 \times 10^{-13}$	$[H^+]^{0.22}$
Kaolinite	500	$\pm 4.9 \times 10^{-12}$	$[H^+]^{0.3}$
Goethite	10000	$\pm 10^{-7}$	-
Calcite	50	-	-
Uraninite	500	$\pm 3.2 \times 10^{-8}$	$[H^+]^{0.37}$

TABLE 5.3 – *Modèle thermodynamique par faciès dans le bloc de production PB01. La concentration en uraninite est donnée par les réalisations*

Minéral	Surface spécifique des minéraux (cm^2/g)	Constante cinétique de réaction - $Log_{10}k$ ($mol/m^2/s$)	Effet catalyseur
Quartz (Cristobalite-α)	2000	$\pm 2 \times 10^{-14}$	-
Smectite (Beidellite Fe)	6×10^5	$\pm 1.2 \times 10^{-13}$	$[H^+]^{0.4}$
Kaolinite	500	$\pm 4.9 \times 10^{-12}$	$[H^+]^{0.78}$
Goethite	10000	$\pm 10^{-7}$	-
Calcite	50	$\pm 2 \times 10^{-6}$	-
Uraninite	500	$\pm 3.2 \times 10^{-8}$	$[H^+]^{0.37}$

TABLE 5.4 – *Modèle thermodynamique par faciès dans le bloc de production PB02. La concentration en uraninite est donnée par les réalisations*

Modèles hydrodynamiques

Tout d'abord, le lithotype simulé lors de la géomodélisation est divisé en trois valeurs : sable grossier, sable fin, et argile. Cependant, l'expérience de modélisation des experts montre qu'assimiler les "Sables grossiers" et les "Sables fins" en une seule valeur "Perméable" est une approximation raisonnable. La conductivité hydraulique dans le lithotype perméable est homogène et égale à 10^{-4} m/s. La conductivité hydraulique dans les argiles, lithotype supposé très peu perméable, est de 10^{-9} m/s. La porosité dans tous les lithotypes est homogène et de 23%.

Les simulations de l'ISR ne prendront en compte que les écoulements imposés par les puits. L'écoulement naturel de la nappe est négligeable au cours de l'exploitation.

Paramètres opérationnels

On rappelle que nous nous plaçons dans le cas de simulations de l'ISR faites avant la mise en production des blocs. Ainsi, les débits d'injections et de productions, ainsi que la composition chimique exacte des fluides injectés au cours de l'exploitation ne sont pas connus. Nous avons choisi les valeurs de ces paramètres de manière à simuler la réalité opérationnelle.

Tout d'abord, les cellules de production ont un débit constant au cours de toute la durée de l'exploitation de 12 m^3/h. Ce débit est proche du débit réel des puits lorsqu'ils ne sont pas soumis à un processus de colmatage. La décroissance des débits au puits étant inconnue, on fait ici l'hypothèse de la négliger. Le débit du fluide aux puits injecteurs est calculé de manière à obtenir une balance injection/production nulle. Même si certains travaux récents montrent que l'équilibre parfait n'opti-

mise pas la récupération de l'uranium [Vergnaud et al., 2019], le respect de cet équilibre a longtemps été un objectif opérationnel. Une sur-production entraînant le pompage de d'eau de l'aquifère stérile en uranium dissous, et une sous-production une perte de fluide lixiviant riche en uranium dissous.

Cependant, ces débits constants ne prennent pas en compte deux phénomènes. Le premier est la décroissance des débits au cours du temps dûe au colmatage autour des puits de production. Une solution parfois envisagée lors de simulations de l'ISR est d'appliquer une décroissance annuelle de 85% des débits de productions. Le deuxième phénomène non pris en compte est le doublement de puits de production et/ou d'opérations de décolmatage des plus colmatés d'entre eux au cours de la vie du bloc. Le choix a été fait d'ignorer ces deux contraintes opérationnelles.

Le deuxième type d'hypothèse sur les paramètres opérationnels correspond à la composition chimique du fluide injecté. L'exploitation par ISR acide nécessite une injection continue d'acide afin de garder un pH suffisamment bas pour permettre la mise en solution de l'uranium. Il y a donc une première phase d'acidification forte au début de l'exploitation, puis une diminution de la quantité d'acide injectée jusqu'à un état stationnaire. De plus, le fluide produit est ensuite traité en usine avant d'être réinjecté aux puits injecteurs en circuit fermé. Ainsi, la concentration en Fe(III) dissous à l'injection augmente au cours du temps. On a donc choisi de représenter les variations de valeurs de ces paramètres dans la solution injectée des simulations. Les tableaux 5.5 et 5.6 présentent les variations d'injections de Fe(III) et d'acide au cours du temps lors de l'exploitation de chaque bloc.

Temps d'exploitation (jours)	H_2SO_4 (g/L)	Fe (III) (mg/L)
0	7	1
10	20	1
30	20	100
40	10	100
70	6	100
230	4	100

TABLE 5.5 – *Composition chimique du fluide injecté - PB01*

Temps d'exploitation (jours)	H_2SO_4 (g/L)	Fe (III) (mg/L)
0	7	1
10	20	1
30	20	100
40	10	100
60	5	100
210	3	100

TABLE 5.6 – *Composition chimique du fluide injecté - PB02*

Limites de ces hypothèses paramétriques

Si les valeurs choisies comme paramètres de ces simulations viennent autant que possible de la littérature autant externe qu'interne à Orano Mining, certaines valeurs sont choisies d'après l'expérience empirique des opérateurs et des modélisateurs. Ces valeurs étant choisies sans connaître la production réelle des blocs, celles-ci ne sont pas ajustées pour faire correspondre les résultats de simulations à la production réelle. Cette probable différence entre le résultat des simulations ISR avec la production réelle proviendra donc à la fois de l'incertitude géologique, représentée par les réalisations différentes en entrée de simulations ISR, de l'incertitude sur les valeurs des propriétés du milieu, tels que les paramètres géochimiques, et de l'incertitude opérationnelle, qui correspond à la divergence entre l'exploitation réelle et celle prévue en amont. Nous rappelons que dans cette thèse nous nous intéressons uniquement à la quantification de l'incertitude de production d'uranium créée par l'incertitude existante sur la géologie. La quantification d'incertitude liée aux valeurs des

paramètres d'entrée des simulations, tels que les paramètres géochimiques ou hydrodynamiques, fait intervenir d'autres méthodes que celles présentées dans ce manuscrit. Ces méthodes font partie de la catégorie des méthodes de quantification d'incertitude par analyse de sensibilité des paramètres. Ainsi, il faut garder à l'esprit l'incertitude portant sur les paramètres hydrogéochimiques lors de l'interprétation des résultats de simulations, et ultérieurement lors de l'interprétation des résultats de simulations proxys.

Une autre hypothèse est posée lors de ces simulations ISR. Il s'agit de la position des puits et crépines du bloc. Dans les expériences numériques que nous menons, on considère que les positions des puits et des crépines ne varient pas entre les réalisations. En pratique, la taille et la position verticale des crépines sont choisies par l'opérateur lors du forage des puits technologiques et en regard des coupes géologiques dessinées à l'aide des trois phases de forages. Dans notre cas, la position des puits et des crépines ne sera pas optimisée à partir de cette information. On aura donc la simulation de l'ISR dont les réalisations géostatistiques sont contraintes à l'aide des phases ED (exploration et développement) mais dont les crépines sont positionnées d'après les coupes conditionnées aux phases EDT (exploration, développement et technologique). Ainsi, en fonction des réalisations, certaines crépines n'auront pas un positionnement idéal pour optimiser la lixiviation de la minéralisation et la récupération des fluides enrichis en uranium dissous. De plus, le champ de puits est simplifié. Certains puits doublés au cours de la vie du bloc ne sont pas représentés.

L'incertitude sur la répartition spatiale des propriétés géologiques est représentée par cent réalisations dans deux blocs de production. Pour chacune de ces réalisations, l'exploitation par ISR est simulée par transport réactif. Ainsi, la différence de production entre les réalisations d'un même bloc sera la conséquence directe de la variabilité sur la répartition spatiale des propriétés.

5.2.2 Simulations de l'ISR et variabilité des résultats

La simulation de l'ISR dans une réalisation permet de quantifier numériquement le comportement physico-chimique du bloc durant l'exploitation. La consommation de réactif, la production d'uranium ou le volume lixivié à une date donnée sont des exemples de résultats. Ces données sont l'objectif des simulations ISR-U. La production d'uranium d'un bloc de production est classiquement présentée sous deux formes. La première est la masse cumulée d'uranium extraite au cours du temps, et la deuxième est la mesure de la concentration en uranium sortant des puits chaque jour. Cette concentration extraite du bloc, multipliée par la somme des débits des puits producteurs donne la masse d'uranium produite à chaque pas de temps. Pour fluidifier le discours ultérieur, on parlera respectivement de la "production cumulée d'uranium" d'un bloc de production (tonnes) et de la "production instantanée d'uranium" d'un bloc (mg/L).

Une simulation de l'exploitation de l'uranium par ISR dans une réalisation est appelée "simulation ISR-U".

Production d'uranium dans PB01 et PB02

Les simulations ISR-U par transport réactif à l'aide d'Hytec sont effectuées dans les cent réalisations géostatistiques des blocs PB01 et PB02. Les productions cumulée et instantanée d'uranium à l'échelle de chaque bloc sont calculées dans chacune des réalisations et sont présentées à la figure 5.7.

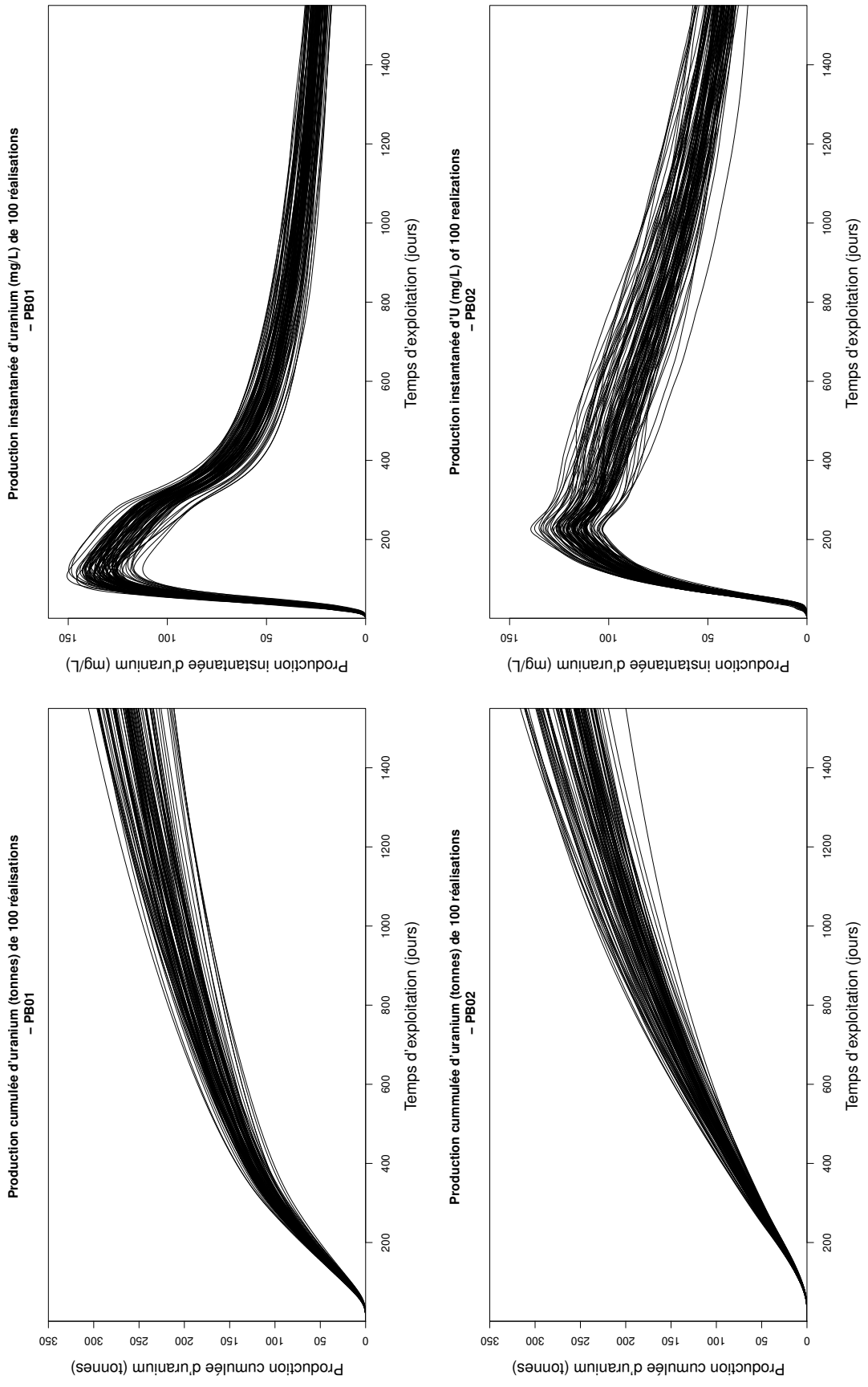

FIGURE 5.7 – *Graphiques montrant les productions cumulées et instantanées d'uranium des cent réalisations du bloc de production PB01 et PB02. La variabilité des courbes de production est une conséquence de la variabilité de la répartition spatiale des propriétés dans les réalisations.*

Dans chacun des blocs, les différences de productions sont le résultat de différents facteurs : la variabilité de la répartition spatiale des propriétés entre les différentes réalisations, la variabilité des résultats de simulations (volume perméable ou tonnages d'uranium dans le contour du champ de puits dans chaque réalisation, par exemple) et la position de la minéralisation par rapport aux crépines.

Le tableau 5.7 présente le temps de calcul nécessaire pour chacun des deux blocs de production.

	Min (h)	Median (h)	Mean (h)	Max (h)
Simulation ISR-U PB01 (1550 jours)	20	22.5	23.3	39.1
Simulation ISR-U PB02 (1550 jours)	10.5	13.6	13.8	31.9

TABLE 5.7 – *Temps de calcul nécessaire pour chaque simulation ISR-U des blocs PB01 et PB02 pour cent réalisations*

Synthèse de l'incertitude sur la production d'uranium

La variabilité de ces courbes peut être résumée à l'aide de quatre variables importantes pour les opérateurs miniers.

Tout d'abord, le pic de production correspond à un moment crucial de la vie du bloc. Il s'agit du moment où la production est la plus efficace, i.e. le fluide produit est extrêmement riche en uranium. Au niveau de ce pic, deux paramètres sont importants : la date d'arrivée du pic et son amplitude. Ces deux paramètres permettent de gérer la concentration des fluides arrivant à l'usine afin d'optimiser l'extraction de l'uranium. Les figures 5.8 et 5.9 montrent les histogrammes pour chacune de ces variables respectivement dans les blocs PB01 et PB02. On y observe dans chacun des cas une importante variabilité entre les réalisations. Les tableaux 5.8 et 5.9 présentent les valeurs médianes, moyennes, minimum, maximum et l'écart-type de ces variables.

La masse totale d'uranium extraite en fin d'exploitation, donnée par la fin de la simulation, est nécessaire pour vérifier l'atteinte des objectifs du plan minier.

Enfin, la production instantanée d'un bloc en fin de simulation permet d'appréhender la date de fermeture du bloc qui est donnée lorsque cette concentration passe sous un seuil. Ce seuil est défini comme la concentration où le fluide produit n'est plus assez riche en uranium dissous pour que le bloc reste économiquement rentable. De plus, cette concentration en fin d'exploitation est représentative de la vitesse de production de l'uranium après le pic de production. C'est au cours de cette phase post-pic que la majorité de la production est effectuée, [Lagneau et al., 2019].

Variables	Min	Médiane	Moyenne	Max	Écart-type
Amplitude du pic de production (mg/L)	112.7	132.9	133.1	150.8	7.64
Date d'arrivée du pic de production (j)	99	124	124.2	147	9.9
Concentration finale d'U produite (mg/L)	17.2	23.6	24	30.6	3
Masse totale d'uranium extraite (T)	211.5	261.6	261	305.8	20.9

TABLE 5.8 – *Statistiques sur la production d'uranium du bloc de production PB01*

Variables	Min	Médiane	Moyenne	Max	Écart-type
Amplitude du pic de production (mg/L)	103	117.7	118.4	139.3	8
Date d'arrivée du pic de production (j)	221	228	228.1	239	3.75
Concentration finale d'U produite (mg/L)	29.8	43.2	44	57.6	5.5
Masse totale d'uranium extraite (T)	200	256.6	263.1	316.3	23.9

TABLE 5.9 – *Statistiques sur la production d'uranium du bloc de production PB02*

Avec les courbes de production des réalisations, il est possible de calculer différentes quantités sur la loi de probabilité de la production d'uranium qu'elles représentent. À chaque pas de temps,

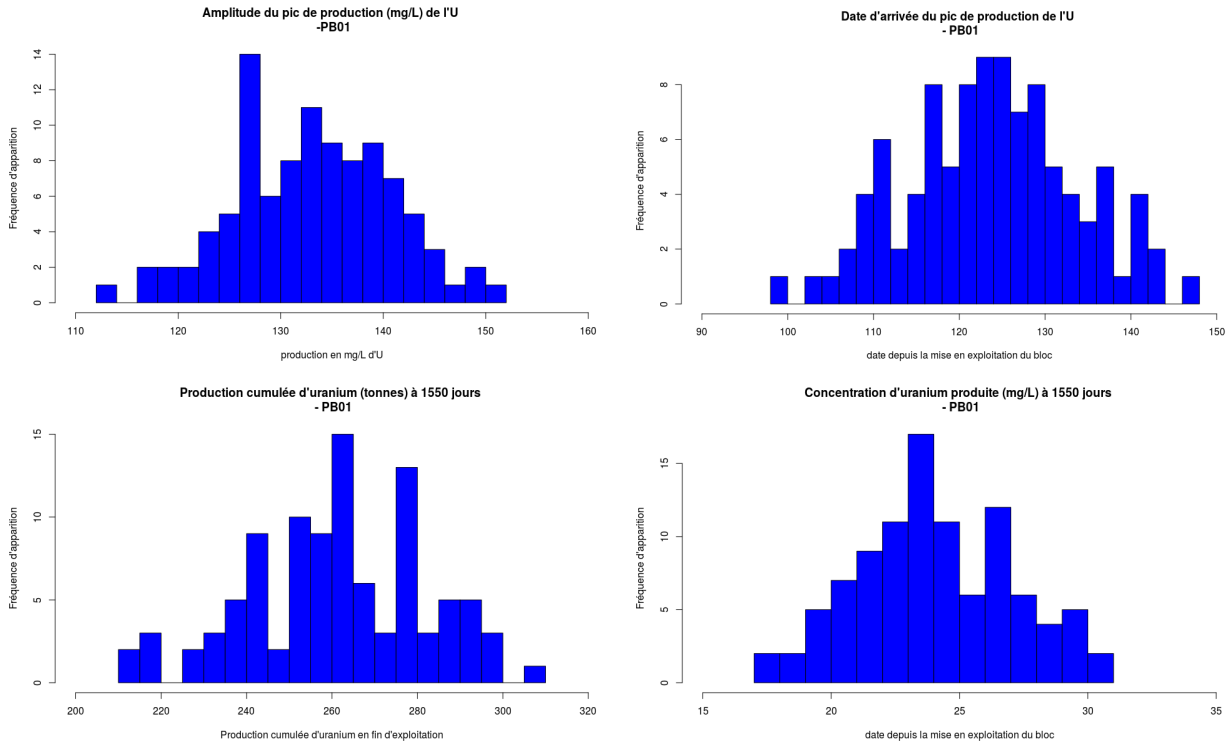

FIGURE 5.8 – *Histogrammes des quatre variables résumant la variabilité de la production d'uranium de PB02*

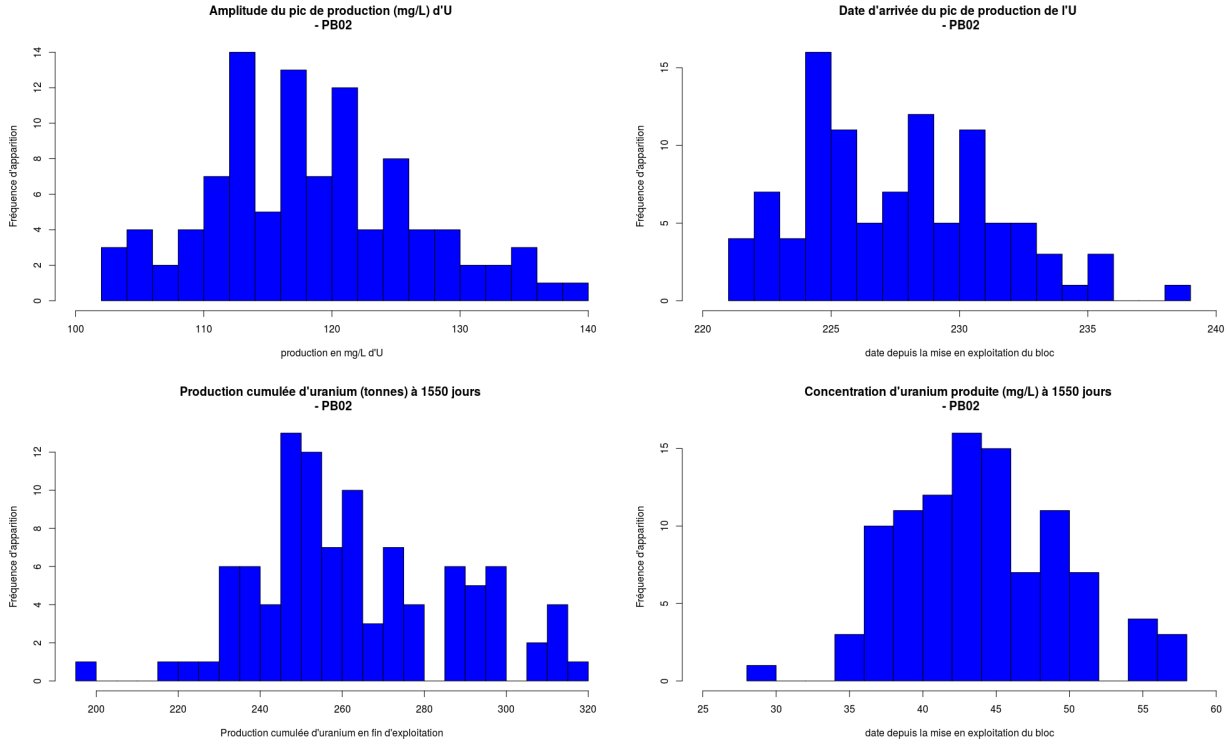

FIGURE 5.9 – *Histogrammes des quatre variables résumant la variabilité de la production d'uranium de PB02*

on peut sélectionner la valeur de production parmi les réalisations, telle que la probabilité P d'être inférieure à cette production soit de x : P(prod)$< x$. Cette méthode permet de calculer les courbes de productions P10, P50 et P90 où x est égale à 0.10, 0.50 et 0.90 respectivement. Ces courbes sont construites à chaque pas de temps et sont présentées sur le deuxième graphique de la figure 5.10 en rouge. Ces courbes sont calculées en instantanée et en cumulée sur chaque bloc grâce aux cent courbes de production. Ainsi, cette quantification d'incertitude obtenue par propagation directe de l'incertitude aléatoire va nous servir de référence. Ces références seront ultérieurement utilisées comme comparaison sur la quantification d'incertitude obtenue avec utilisation de la réduction de scénarios.

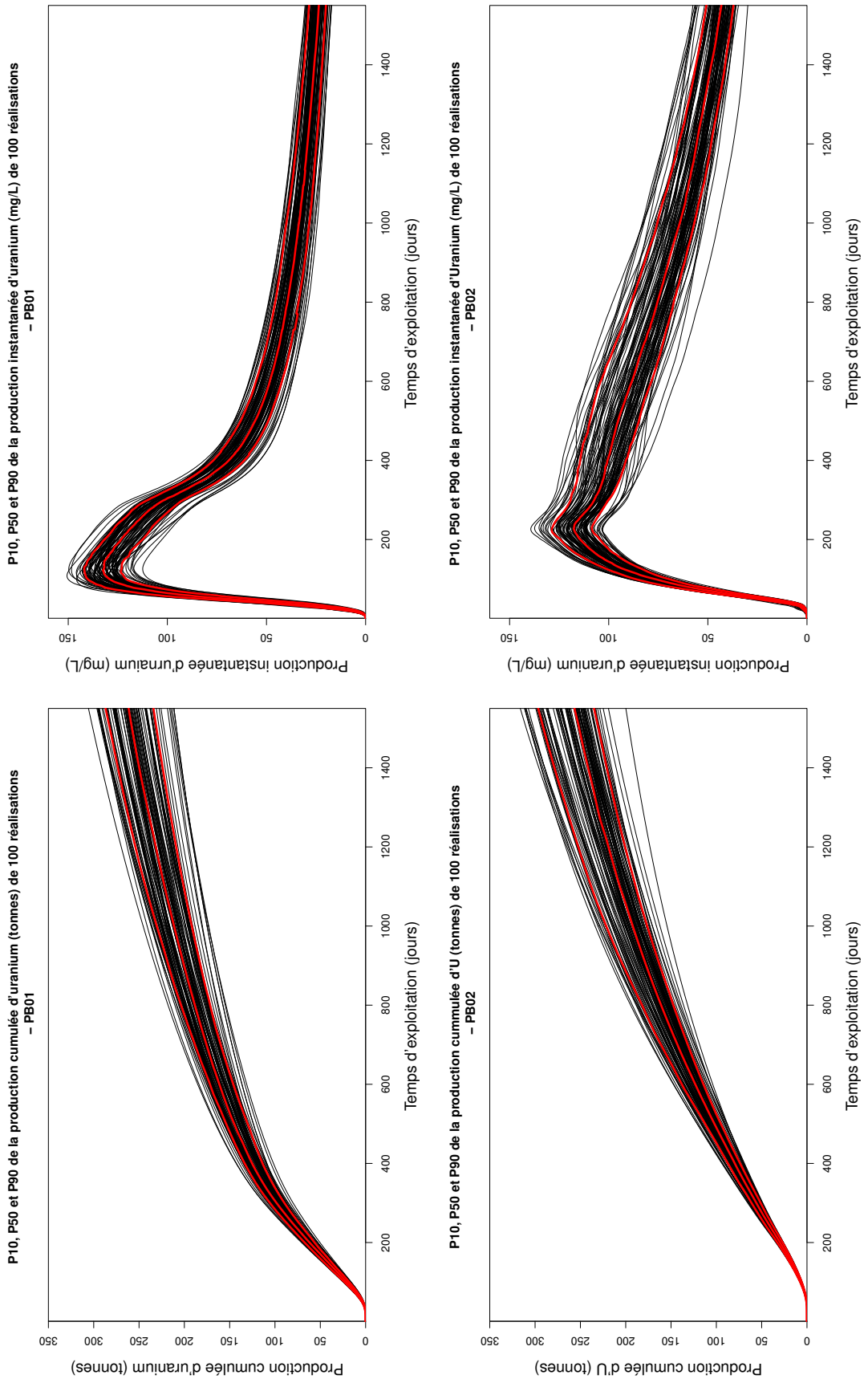

FIGURE 5.10 – *Graphiques montrant les productions cumulées et instantanées d'uranium des cent réalisations du bloc de production PB01 et PB02. La variabilité des courbes de production est une conséquence de la variabilité de la répartition spatiale des propriétés dans les réalisations.*

5.2.3 Conclusion de la propagation directe de l'incertitude à partir de réalisations conditionnées ED

L'ensemble des réalisations du modèle géostatistique de chacun des blocs permet d'obtenir une représentation de la variabilité de la répartition spatiale des propriétés. Calculer la simulation ISR-U avec l'ensemble des réalisations permet d'obtenir un échantillonnage de la loi de probabilité de la production d'uranium sous-jacente en propageant l'incertitude représentée par cet ensemble. Cependant l'échantillonnage de la variabilité de la production d'uranium sur cent réalisations d'un bloc est possible dans un contexte de recherche, mais pas dans un contexte opérationnel. La réduction de scénarios permet de sélectionner un sous-ensemble de réalisations parmi toutes afin d'obtenir une approximation de cette variabilité. La propagation directe effectuée dans ce chapitre sur l'ensemble des réalisations des deux blocs va servir de référence à laquelle sera comparée les résultats des différents tests de réduction de scénarios.

5.3 Propagation directe avec conditionnement aux puits technologiques

Une question couramment posée est celle de l'impact de l'utilisation de plus d'information lors de la construction des réalisations. En effet, l'augmentation de données permet de mieux inférer les modèles géostatistiques et de mieux contraindre les simulations. Grâce aux travaux de Freulon [2017] et Petiteau [2015], une base de données de cent réalisations du bloc PB01 a été construite en utilisant les données de puits de la phase d'exploration, de développement et de la phase technologique. Les trois propriétés lithotype, lithofaciès OMR et la teneur en uranium sont simulées. Tout comme le jeu initial de réalisations, le domaine de modélisation est grand et englobe quatre blocs dont on extrait les réalisations de PB01. Les modèles sont contraints par les 140 puits de la phase d'exploration et de développement, et 203 puits de la phase technologique. Les cent réalisations du bloc PB01 sont désormais bien plus contraintes. L'incertitude sur la répartition spatiale est bien moins élevée. Afin d'observer l'impact de la diminution de l'incertitude sur la répartition spatiale des propriétés sur l'incertitude de la production d'uranium, l'exploitation d'uranium par ISR est simulée dans les cent réalisations mises à jour avec les données de puits de la phase technologique.

L'exploitation est simulée sur 1100 jours. La récupération d'uranium peut être observée pour chaque réalisation comme une production cumulée en tonnes ou une production instantanée en mg/L. La variabilité des courbes peut être quantifiée à l'aide de la construction des courbes P_{10}, P_{50} et P_{90}. La figure 5.11 montre la comparaison entre les courbes construite sur les réalisations conditionnées aux puits d'exploration et de développement et les courbes des réalisations mises à jour avec les puits technologiques. On peut faire deux constats partant de ces résultats. Tout d'abord, on observe que les courbes P_{50} tendent à se rejoindre vers la fin des simulations. Il s'agit d'un hasard, aucun facteur d'homogénéisation entre les deux ensembles de réalisations n'a été appliqué. Deuxièmement, on observe clairement une diminution de la taille de l'enveloppe d'incertitude entre les deux jeux de production d'uranium. Il s'agit de la conséquence directe de l'augmentation de la densité de puits. L'augmentation de la quantité de données permettant de conditionner les réalisations conduit à une diminution de la variabilité entre les différentes réalisations générées. La diminution de l'incertitude sur la répartition spatiale des propriétés se répercute ensuite par une diminution de la variabilité de la production d'uranium. On remarque de plus que la nouvelle enveloppe d'incertitude obtenue avec les réalisations conditionnées EDT est globalement incluse dans l'enveloppe des réalisations conditionnées ED. Ceci semble vérifier que le conditionnement est une réduction d'incertitude.

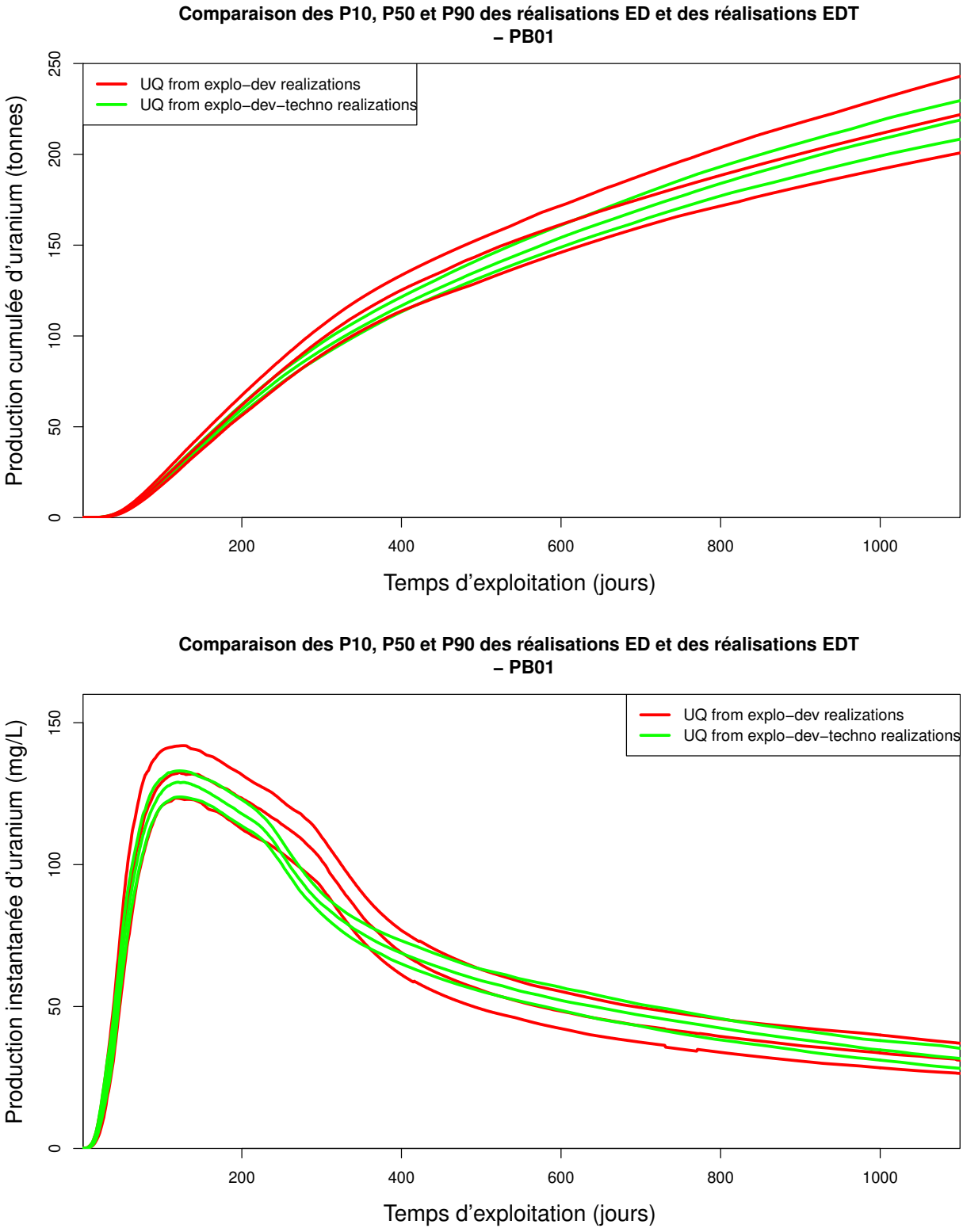

FIGURE 5.11 – *Comparaison des quantifications d'incertitude des simulations ISR-U faites avec les réalisations conditionnées exploration développement et des quantification d'incertitude des simulations ISR-U calculées avec les réalisations conditionnées exploration développement et technologique sur PB01. Les courbes P_{50} tendent à se rejoindre vers la fin des simulations. Il s'agit d'un hasard, aucun facteur d'homogénéisation entre les deux ensembles de réalisations n'a été appliqué. Deuxièmement, On observe clairement une diminution de la taille de l'enveloppe d'incertitude entre les deux jeux de production d'uranium. L'enveloppe d'incertitude de production des réalisations mises à jour est à peu près incluse dans l'enveloppe initiale*

5.4 Conclusion de la propagation directe de l'incertitude

La section précédente montre l'intérêt d'utiliser plus d'informations via les puits de la phase technologique pour inférer le modèle géostatistique et pour contraindre les simulations obtenues. Cependant, l'incertitude de production de réalisations contraintes aux puits d'exploration et de développement est particulièrement importante. C'est cette incertitude que l'on cherche à quantifier. La suite des travaux de thèse s'effectuent donc avec les réalisations conditionnées uniquement aux puits des phases d'exploration et de développement.

L'intérêt de la réduction de scénarios se situe dans le choix rapide et judicieux du sous-ensemble de réalisations. Ce choix se base sur une description des réalisations à l'aide de proxys. Les chapitres suivants présentent les différents proxys conçus et testés au cours de cette thèse. La conception et l'évaluation des proxys reposent sur le respect de plusieurs critères : leur rapidité de calcul, leur souplesse d'utilisation, et surtout la qualité de leurs résultats.

Ainsi, différents types de proxys sont testés. Les premiers sont ceux qui se contentent de calculer des grandeurs directement sur les propriétés géologiques des réalisations. Les deuxièmes font intervenir une simulation rapide d'écoulement et de transport de traceurs en solution dans l'aquifère. Les troisièmes nécessitent la simulation de la lixiviation d'un minéral unique. Et le dernier présente les premiers essais d'un modèle de proxy basé sur l'apprentissage automatique de la résolution de la chimie dans les simulations de transport réactif. Ces proxys sont décrits dans les chapitres suivants.

Chapitre 6

Les proxys statiques

6.1 Principes et intérêts du calcul de quantités sur les réalisations

6.1.1 Intérêts, avantages, et volonté derrière les descripteurs statiques

Un proxy a pour objectif d'obtenir une approximation des résultats d'une simulation plus longue et plus complexe. Comme le montrent les simulations ISR-U du chapitre précédent, une simulation de transport réactif est très coûteuse en temps. On cherche donc à construire un ou plusieurs proxys qui vont nous permettre d'approximer la production d'uranium d'une réalisation donnée. En appliquant le ou les proxys sur l'ensemble du jeu de réalisations, on obtient donc une approximation de la dissimilarité des réalisations en terme de production d'uranium. L'approximation de la dissimilarité se synthétise à l'aide de quelques descripteurs sur lesquels se base la réduction de scénarios.

La première gamme de proxys présentée est celle des proxys obtenue à l'issue d'un calcul de valeurs statiques sur les réalisations. Ces proxys sont les plus simples à appréhender et peuvent prendre différentes formes : grandeurs scalaires, histogrammes, ... Les proxys statiques présentent différents intérêts. Tout d'abord, ceux-ci n'utilisent pas de simulateurs d'exploitation pour approcher la récupération de l'uranium. L'économie du temps de résolution de l'écoulement et de la chimie en font des proxys particulièrement rapides. Les caractéristiques sont quantifiées directement sur les réalisations. Grâce à leur rapidité de calcul, ils sont des outils facilement déployables en opération. De plus, les quantités calculées sont à la fois facilement concevables et facilement manipulables.

Ce sont les raisons pour lesquelles nous nous sommes penchés en premier lieu sur ceux-ci. Divers exemples provenant de l'industrie pétrolière et gazière peuvent être cités, tel que la connectivité entre les puits producteurs et injecteurs, ou le STOOIP (volume d'hydrocarbures originellement en place en condition de surface). Cependant, la connectivité entre les puits dans un milieu avec une conductivité hydraulique telle que celui du bloc PB01 et PB02 n'est pas discriminante envers la production d'uranium.

6.1.2 Caractérisation de grandeurs dans chaque réalisation

Les descripteurs statiques considérés au cours de cette thèse sont présentés ci-dessous. Les calculs des descripteurs statiques sont effectués sur toute la hauteur de la réalisation, mais sont limités horizontalement par la bordure des puits injecteurs externes du bloc de production.

Tonnage de l'uranium

De manière assez directe, de la même manière que ce qui se fait dans l'industrie pétrolière et gazière, la *Masse d'uranium* dans le gisement est considérée comme un descripteur de la quantité d'uranium maximale que l'on peut extraire du réservoir au cours de l'exploitation par ISR. Cependant, dans n'importe quelle exploitation il y a des pertes, et l'ensemble de l'uranium n'est pas récupérable. Il s'agit en général d'uranium situé dans des zones difficiles d'accès par les fluides injectés et donc non dissous, et de l'uranium dissous mais non récupéré ensuite. La ressource est donc en théorie supérieure à la production finale.

Volume de la minéralisation

Le *Volume de la minéralisation* est aussi considéré comme descripteur. En effet, en considérant la dissolution de l'uranium comme une réaction contrôlée cinétiquement, la surface de réaction aura son importance dans la dissolution du minéral. La réaction n'est pas uniquement dépendante de l'apport en réactif. Cette surface de réaction augmente avec la répartition des minéraux uranifères sur de grands volumes.

Différenciation des zones minéralisées à haute teneur en uranium et à basse teneur

Le contrôle cinétique de la dissolution de l'uraninite est un processus déterminant qui impacte les variations de production d'uranium dans les résultats de simulation de la lixiviation. Ainsi, les roches minéralisées à faible teneur seront rapidement lixiviées, alors que celles à forte teneur auront tendance à se dissoudre en un temps plus long. Ainsi, les réalisations avec des teneurs plutôt faibles auront tendance à extraire vite l'uranium. Cela se traduit par un pic de production élevé qui décroît rapidement. À l'inverse, à tonnage égal, les réalisations avec des teneurs en uranium relativement plus fortes auront un pic de production plus faible mais produiront plus longtemps. Cette différence de production lorsque l'uranium est plutôt diffus ou plutôt en pépite nous a fait considérer une séparation des descripteurs en fonction d'une valeur seuil de teneur en uranium. Cette valeur est fixée d'après l'expérience des modélisateurs telle que 75% des données aux puits régularisés sur 1m, soient qualifiées de "Basses Teneurs" et 25% qualifiées de "Hautes Teneurs". Aucune étude de sensibilité autour de la valeur de ce seuil n'a été effectuée.

Tonnage des hautes et basses teneurs

En plus du descripteur *Tonnage*, on calculera le descripteur *Tonnage des Basses Teneurs*, qui correspond au tonnage d'uranium contenu dans les voxels simulés avec une teneur inférieure au seuil, et le descripteur *Tonnage des Hautes Teneurs*, qui correspond au tonnage dans les voxels simulés ayant une teneur supérieure au seuil.

Volume des hautes et basses teneurs

De même que pour le tonnage, deux descripteurs différents sont calculés à partir du volume de minéralisation sous le bloc de production et à partir de la séparation des hautes et basses teneurs. Le volume de roche constitué de minéralisation ayant une teneur inférieure à la teneur seuil, et le volume de roche minéralisée ayant une teneur supérieure au seuil. On nommera ces descripteurs respectivement "*Volume des Basses Teneurs*" et "*Volume des Hautes Teneurs*".

Proportion des hautes et basses teneurs

Afin d'introduire l'information de la relation entre le volume minéralisé, le volume de haute teneur, le descripteur donnant la valeur de la proportion relative du nombre de voxels hautes teneurs par rapport au nombre de voxels minéralisés est calculé. De même, on calcule le descripteur de la proportion du nombre de voxels basses teneurs par rapport au nombre de voxels minéralisés.

Ces huit descripteurs peuvent être utilisés comme base de description des réalisations lors de la réduction de scénarios. Afin de déterminer les descripteurs les plus utiles, différents tests sont effectués avec diverses combinaisons de descripteurs. La section suivante décrit la recherche de la meilleur combinaison de descripteurs, son résultat sur PB01, sa validation sur PB02, et discute des limitations de ces descripteurs.

6.2 Combinaison de descripteurs et nombre de médoïdes

Dans cette partie nous décrivons deux applications de la réduction de scénarios selon la méthode présentée dans le chapitre IV. La première application est faite sur le bloc de production PB01 et sert pour le paramétrage de la méthode. Ce paramétrage comprend le choix de la combinaison de descripteurs utilisée pour décrire les réalisations, et le nombre de réalisations représentatives sélectionnées par les k-médoïdes.

6.2.1 Utilisation d'une distance de référence

L'échantillonnage des réalisations va nous permettre d'échantillonner l'incertitude des réalisations en sélectionnant un sous-ensemble. Les productions instantanées et cumulées des réalisations sélectionnées et leur pondération vont nous permettre de construire chaque jour un histogramme dont on peut calculer les quantiles. L'objectif est de sélectionner les réalisations nous permettant d'approcher au mieux les courbes de quantification d'incertitude P_{10}, P_{50} et P_{90} de référence calculées au chapitre 5 précédent. On va comparer la similarité entre les P_{10}, P_{50} et P_{90} approchées avec celles de référence.

Plus spécifiquement pour la combinaison de descripteurs, son objectif est de décrire et reproduire la dissimilarité de production entre les réalisations. Elle permet la sélection des réalisations pour échantillonner leur incertitude en terme de production d'uranium. On a vu précédemment que l'incertitude sur la production d'uranium peut être résumée par quatre termes :

- l'amplitude du pic de production ;
- la date d'arrivée du pic de production ;
- la concentration en fin de simulation d'exploitation ;
- et la masse cumulée d'uranium extraite.

De même que pour les descripteurs proxys, on peut calculer la dissimilarité des réalisations en terme de production d'uranium. Elle est calculée d'après la distance euclidienne entre toutes les paires de réalisations d'après leurs descripteurs de production d'uranium. Ces distances basées sur la production d'uranium servent de référence que les distances calculées avec les descripteurs cherchent à approximer. Ainsi, on peut utiliser la corrélation entre les distances proxys et les distances de référence entre les paires de réalisations comme un indicateur de qualité de la combinaison de descripteurs. Plus la corrélation sera grande entre ces deux distances, meilleure sera la reproduction de la dissimilarité par les descripteurs proxys.

Le tableau 6.1 présente la corrélation entre les distances calculées sur les quatre descripteurs de la production de l'uranium et les distances calculées d'après les combinaisons de descripteurs des réalisations présentées. Une ligne correspond à une combinaison de descripteurs. La couleur de la cellule indique si le descripteur est utilisé dans la combianison (vert) ou ignoré (rouge). La dernière colonne donne la valeur de la corrélation. Plusieurs remarques sont nécessaires. Tout d'abord, les valeurs absolues des corrélations sont extrêmement faibles. Aucune ne possède un coefficient de corrélation supérieur à 0.51. Il ne semble pas qu'une ou plusieurs combinaisons se distinguent particulièrement des autres.

En plus de la combinaison de descripteurs, un autre paramètre intervient dans la réduction de scénarios : le nombre de médoïdes, i.e. le nombre de réalisations représentatives sélectionnées. La description utilisant tous les descripteurs considérés a été testée sur le bloc PB01, ainsi que le choix du nombre de réalisations représentative via le calcul des coefficients de silhouette.

6.2.2 Application de la réduction de scénarios sur le bloc PB01

L'objectif premier du bloc PB01 est de choisir et tester une combinaison de descripteurs efficaces pour discriminer les réalisations. L'efficacité de la combinaison est maintenant jugée sur la similitude des courbes P_{10}, P_{50} et P_{90} approximées par les réalisations sélectionnées avec celles obtenues par la propagation directe d'incertitude. Les courbes obtenues par la propagation directe sont considérées comme l'enveloppe de référence.

Description des réalisations

Afin de diminuer l'espace de description des réalisations pour faciliter la visualisation des résultats, on applique le multidimensionnal scaling en distance euclidienne sur les descriptions de réalisations. La figure 6.1 présente la part de variance cumulée expliquée par les composantes principales obtenues. Étant donné la forte corrélation entre les descripteurs, le partitionnement des réalisations par l'algorithme des k-médoïdes est fait selon les deux premières composantes principales.

Tonnage total	*Tonnage hautes teneurs*	*Tonnage basses teneurs*	*Volume total*	*Volume hautes teneurs*	*Volume basses teneurs*	*Proportion hautes teneurs*	*Proportion basses teneurs*	*Corrélation des distances*
■	■	■	■	■	■	■	■	0.489
■	■	■	■	■	■	■	■	0.462
■	■	■	■	■	■	■	■	0.473
■	■	■	■	■	■	■	■	0.506
■	■	■	■	■	■	■	■	0.489
■	■	■	■	■	■	■	■	0.449
■	■	■	■	■	■	■	■	0.507
■	■	■	■	■	■	■	■	0.485
■	■	■	■	■	■	■	■	0.485

TABLE 6.1 – *Évaluation de la qualité des combinaisons de descripteurs statiques à l'aide de leur corrélation avec une distance de référence. Les corrélation entre les distances calculées d'après les descripteurs et celles calculées d'après la production d'uranium sont très faibles, et aucune ne semble se démarquer particulièrement du lot*

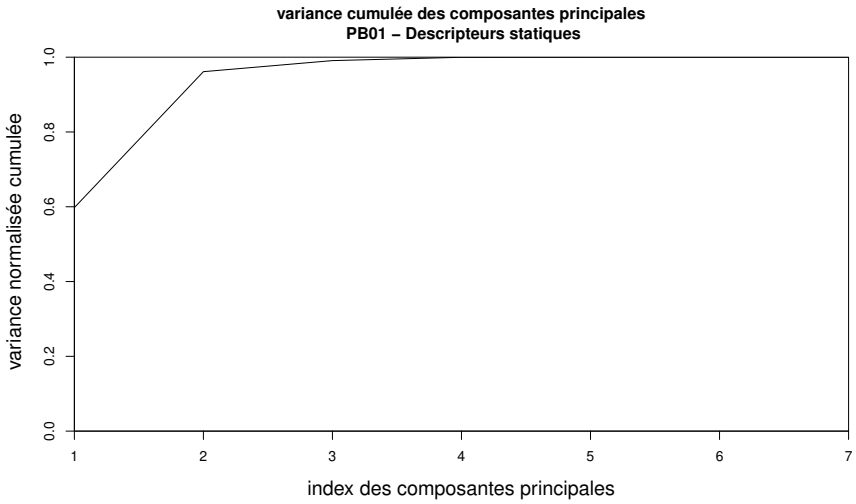

FIGURE 6.1 – *Variance cumulée portée par les composantes principales du MDS sur les descripteurs statiques des réalisations du bloc PB01. Les deux premières composantes expliquent 96.1% de la variance des réalisations*

Partitionnement des réalisations en clusters

Un des paramètres important de la réduction de scénarios est le nombre de clusters à considérer. Ce choix s'effectue en fonction du temps de calcul CPU disponible pour effectuer les simulations ISR-U, et de la qualité de l'approximation de l'enveloppe d'incertitude que l'on souhaite. Afin de nous aider dans ce choix, on peut utiliser la silhouette moyenne du partitionnement des réalisations, qui permet d'avoir une idée de la qualité du partitionnement. Ainsi, la figure 6.2 nous montre la valeur moyenne de la silhouette en fonction du nombre de clusters. Les fortes valeurs de silhouette moyennes dénotent d'une meilleure qualité de partitionnement. Sur la figure, malgré des valeurs de coefficients moyens de silhouette plutôt faibles dans l'absolu, on observe que l'utilisation de 10

clusters offre un meilleur partitionnement, tout en restant suffisamment faible pour calculer les 10 simulations ISR-U.

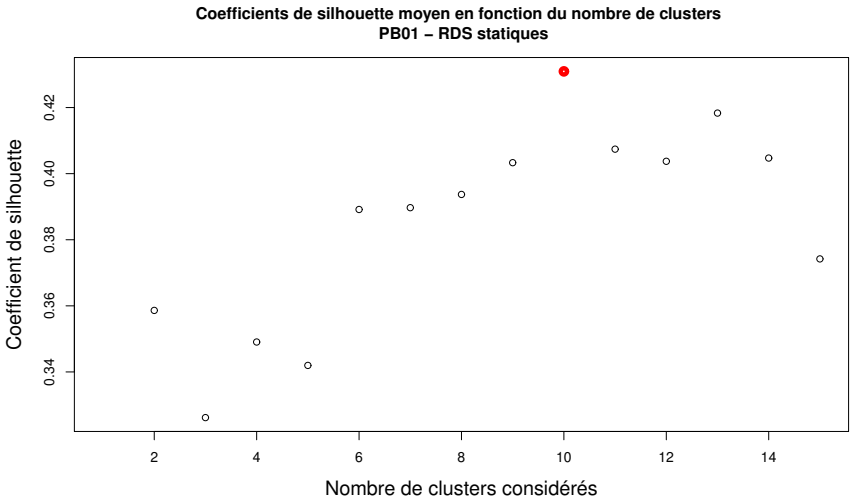

FIGURE 6.2 – *Silhouettes moyennes des réalisations en fonction du nombre de clusters après le partitionnement des réalisations de PB01 avec les descripteurs statiques. Dans ce cas ci, on choisira de sélectionner 10 réalisations représentatives*

Le nuage de points de la figure 6.3 illustre le partitionnement sur dix clusters et la sélection des réalisations représentatives avec lesquelles sont effectuées les simulations ISR-U.

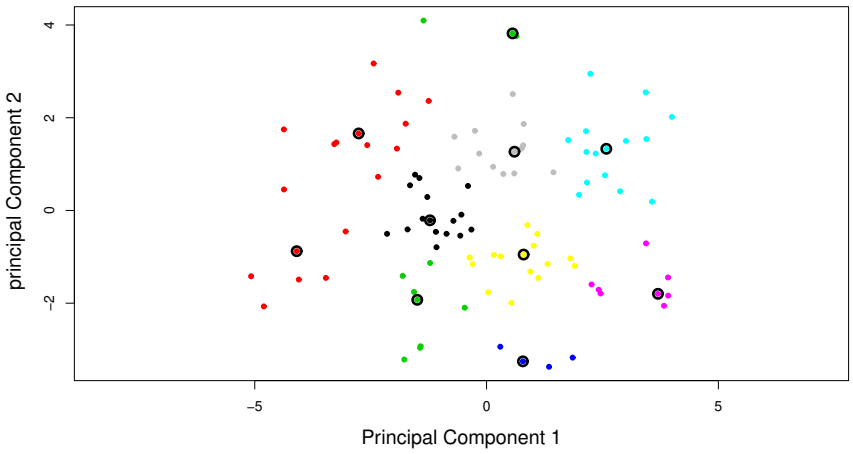

FIGURE 6.3 – *Partitionnement en 10 clusters des réalisations en fonction de PB01 avec les descripteurs statiques. On n'observe aucune structure particulière dans le nuage de réalisations affiché*

Quantification d'incertitude à partir des réalisations sélectionnées

Les productions instantanées et cumulées des 10 réalisations sélectionnées sont présentées sur les graphes de la figure 6.4. À partir de la production de ces quelques réalisations, l'enveloppe d'incertitude peut être évaluée en utilisant la pondération donnée par le partitionnement. Cette enveloppe est calculée comme les déciles P_{10}, P_{50} et P_{90} de la distribution de la production des réalisations à chaque pas de temps. Cette quantification d'incertitude approchée est comparée avec la quantification d'incertitude de la propagation directe figure 6.5. On observe que pour la production cumulée les courbes de quantification d'incertitudes sont globalement bien approchées, avec cependant un

léger biais pour les P_{10} et P_{50} en fin de simulation. La production instantanée présente, quant à elle, une légère sur-estimation du P_{90} du pic de production et une légère sous-estimation du pic du P_{10}. Les P_{10}, P_{50} et P_{90} de la concentration en fin de vie sont très bien approchées. Le résultat est cependant satisfaisant.

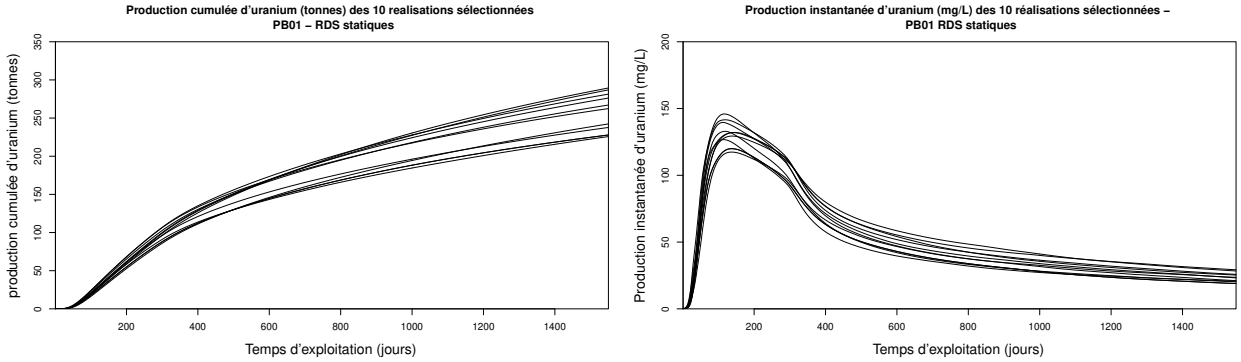

FIGURE 6.4 – *Productions d'uranium cumulées et instantanées des 10 réalisations sélectionnées pour le bloc PB01 avec les descripteurs statiques*

Ainsi, ces huit descripteurs permettent d'obtenir une bonne approximation de l'incertitude que l'on peut quantifier par propagation directe. Cependant, il est nécessaire de tester cette combinaison sur un autre bloc afin de vérifier la robustesse et la pertinence de ces descripteurs.

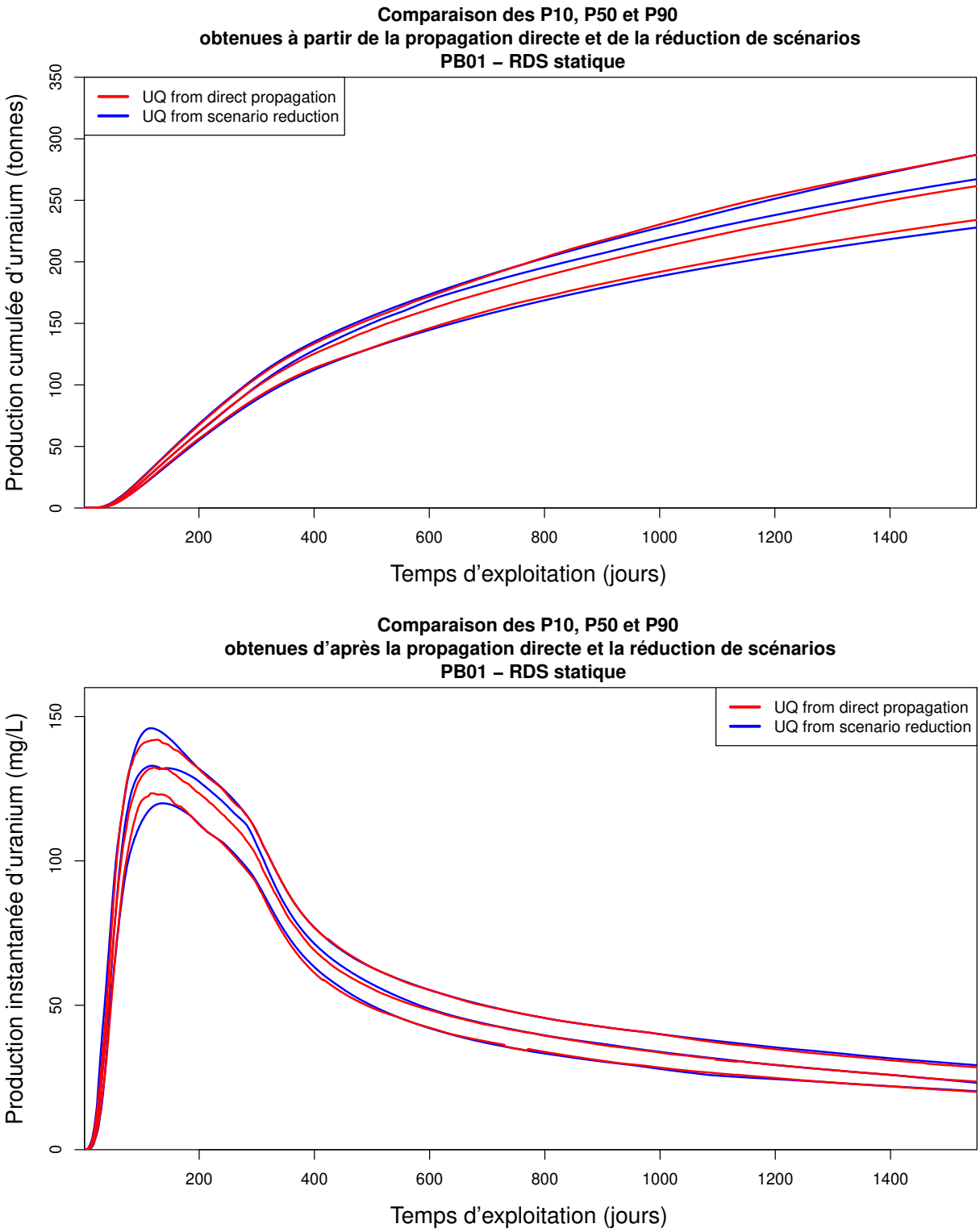

FIGURE 6.5 – *Comparaison de la quantification d'incertitude sur la productions d'uranium cumulées et instantanées des dix réalisations sélectionnées pour le bloc PB01 avec les descripteurs statiques. On observe que les courbes P_{10}, P_{50} et P_{90} de référence sont globalement bien approchées, avec cependant un léger biais pour les P_{10} et P_{50} cumulée en fin de simulation, une légère sur-estimation de P_{90} au niveau du pic, et une légère sous-estimation de P_{10} au niveau du pic.*

6.2.3 Transposition de la combinaison de descripteurs sur le bloc PB02

Description des réalisations

Afin de tester la robustesse de la combinaison de descripteurs obtenue avec le bloc PB01, on appliquera la même combinaison sur le bloc PB02.

De même que pour le bloc PB01, pour observer les dépendances entre les descripteurs sur le bloc PB02, et pour réduire l'espace de description des réalisations, on effectue un Multi-Dimansional Scaling sur les réalisations dans l'espace des descripteurs. La figure 6.6 présente la variance cumulée expliquée par les composantes principales.

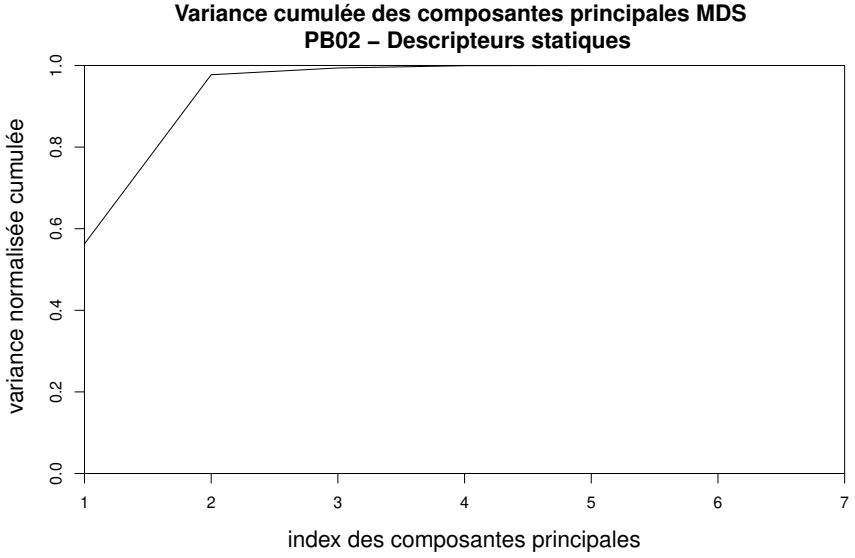

FIGURE 6.6 – *Variance cumulée portée par les composantes principales du MDS sur les descripteurs statiques des réalisations du bloc PB02. Les deux premières composantes expliquent 97.7% de la variance des réalisations*

Les deux premières composantes principales expliquent suffisamment de variance pour que l'on applique le partitionnement dans cet espace réduit à deux dimensions.

Partitionnement des réalisations en clusters

Au contraire de la combinaison de descripteurs, le nombre de clusters à construire grâce à l'algorithme des k-médoïdes reste une variable à ajuster à l'aide des coefficients de silhouette en fonction du nombre de clusters. Ainsi, pour un nombre de clusters allant de 2 à 15, on calcule la silhouette moyenne de l'ensemble des réalisations. On peut observer ces valeurs figure 6.7. De même que pour PB01, on évitera de sélectionner un trop faible nombre de réalisations représentatives afin d'obtenir une approximation correcte de la quantification d'incertitude. Ainsi, on effectue une réduction de scénarios avec neuf clusters. L'utilisation des k-médoïdes permet d'obtenir neuf réalisations représentatives de l'ensemble du jeu.

Quantification d'incertitude à partir des réalisations sélectionnées

En utilisant les réalisations sélectionnées lors du partitionnement pour effectuer des simulations ISR-U, on obtient la production cumulée et instantanée des neuf réalisations. Ces productions sont représentées sur les graphiques de la figure 6.8. On remarque sur ces deux graphiques que l'échantillonnage des réalisations montre une forte hétérogénéité dans la production. Cette hétérogénéité semble montrer deux types de production : une forte et une faible. Cependant, les faisceaux de courbes de production des cent réalisations obtenues lors de la propagation directe ne montrent pas de tel comportement.

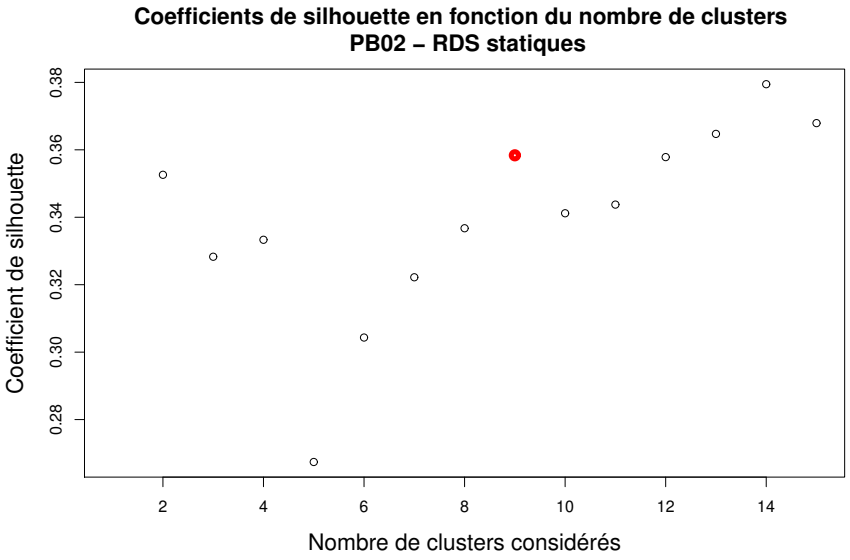

FIGURE 6.7 – *Silhouettes moyennes des réalisations en fonction du nombre de clusters après le partitionnement des réalisations de PB02 avec les descripteurs statiques. Dans ce cas ci, on choisira de sélectionner 9 réalisations représentatives*

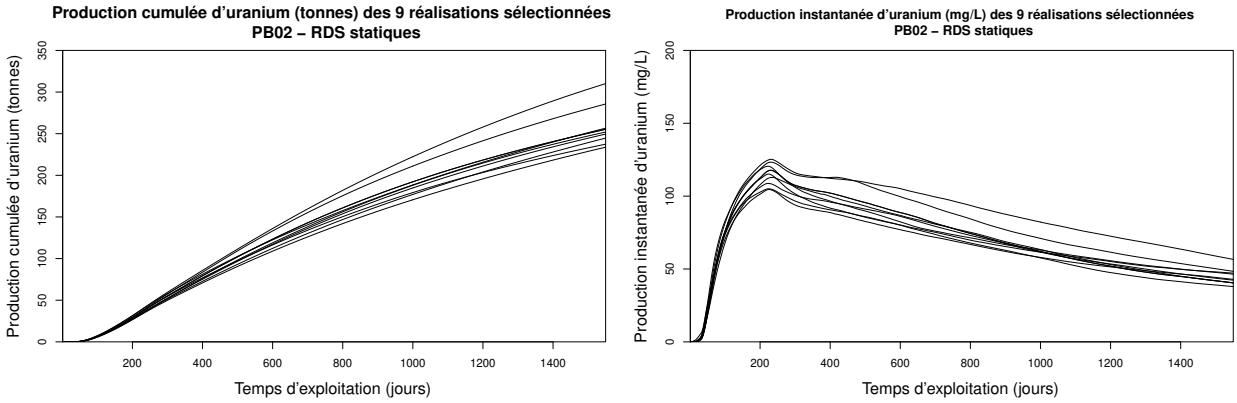

FIGURE 6.8 – *Productions d'uranium cumulées et instantanées des neuf réalisations sélectionnées pour le bloc PB02 avec les descripteurs statiques. La sélection montre deux types de production : une forte et une faible. l'échantillonnage est hétérogène et ne reflète pas la production du jeu de réalisation de référence*

Les courbes de la figure 6.9 montrent les courbes P_{10}, P_{50} et P_{90} approchées par la réduction de scénarios et celles de références calculées d'après la propagation directe d'incertitude. Vis-à-vis de la production cumulée, l'approximation est correcte pour la courbe P_{10}. Le biais est faible pour la courbe P_{50}. En revanche, l'approximation sous-estime fortement la courbe P_{90}. Vis-à-vis de la production instantanée, les courbes approchées reproduisent mal les courbes de référence. En particulier au moment du pic de production, qui est un moment crucial de la production d'un bloc.

Afin d'observer l'impact du choix du nombre de réalisations sélectionnées, les réductions de scénarios avec huit et dix clusters ont été testées mais ont donné des résultats similaires.

Ainsi, la combinaison de descripteurs statiques, qui pourtant permet d'effectuer une sélection correcte de réalisations dans PB01, ne montre pas de résultats concluant pour PB02, soulignant son manque de robustesse.

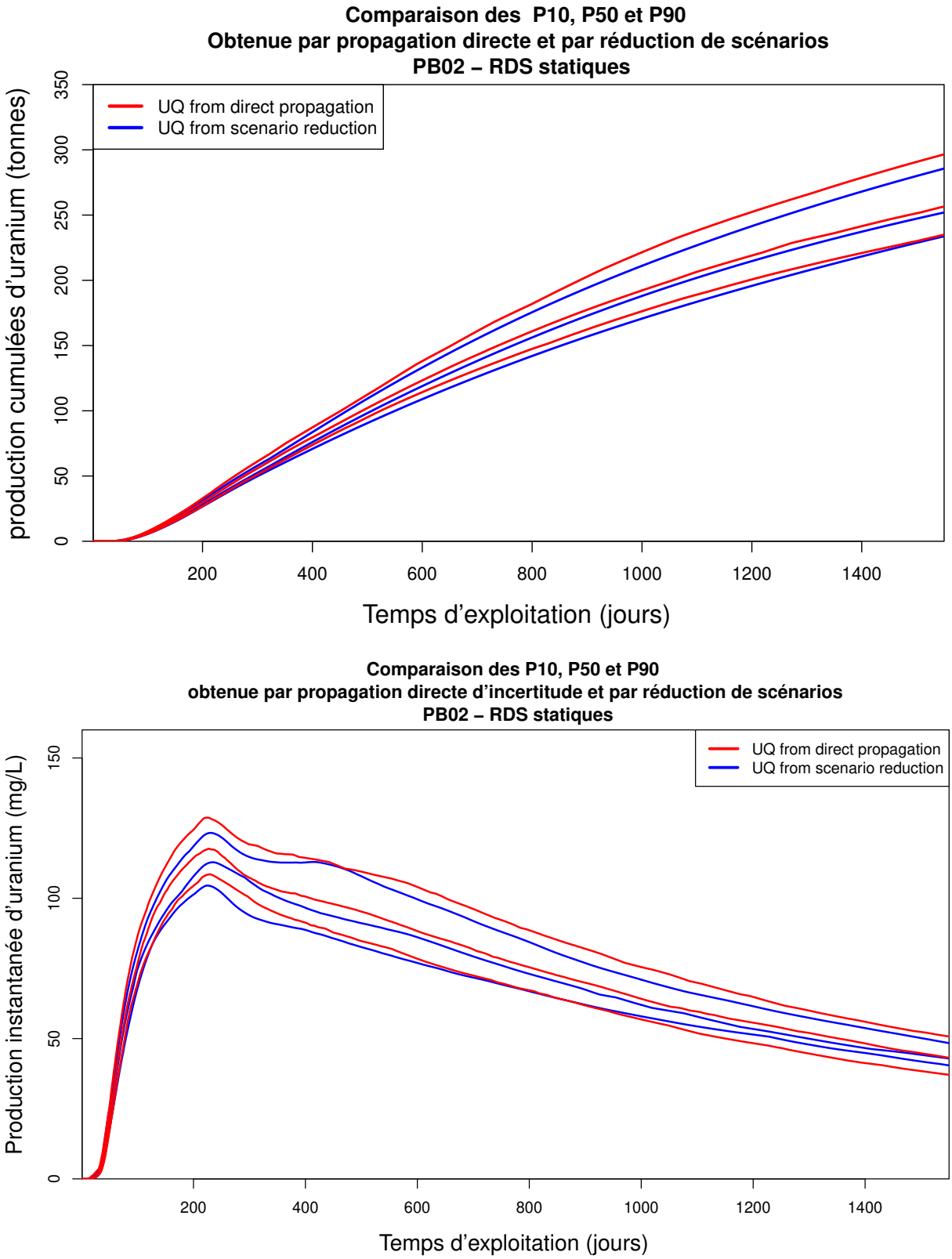

FIGURE 6.9 – *Comparaison de la quantification d'incertitude sur la production d'uranium cumulée et instantanée des neuf réalisations sélectionnées pour le bloc PB02 avec les descripteurs statiques. La courbe P_{90} en production cumulée et les courbes P_{10}, P_{50} et P_{90} en production instantanée approchées par réduction de scénarios s'ajustent mal avec les courbes de référence. L'incertitude est plus particulièrement mal évaluée au niveau du pic de production*

6.3 Discussion des limites des descripteurs statiques

Les descripteurs statiques ne sont pas suffisants pour effectuer une réduction de scénarios efficace donnant des résultats précis. Ceci peut provenir de deux points distincts. Tout d'abord, les descripteurs statiques ne permettent pas de décrire la répartition spatiale des propriétés. Ainsi, divers cas particuliers ne seront pas pris en compte dans la description des réalisations, tels que les répartitions très hétérogènes de l'uranium au sein du bloc. Une deuxième explication vient du fait que la perméabilité dans le milieu n'est pas complètement homogène. Des lentilles imperméables sont incluses dans le réservoir perméable et contrôlent le comportement hydrodynamique du réservoir lors de son exploitation. La répartition des zones du réservoir envahies par le fluide injecté et effectivement récupéré par les puits producteurs est cruciale pour déterminer la quantité d'uranium récupéré in fine.

En conclusion, les descripteurs statiques sont insuffisants pour discriminer et décrire précisément les réalisations en terme de production d'uranium. Il est nécessaire de construire un ou plusieurs proxys permettant d'évaluer les comportements hydrodynamiques de chaque réalisation afin de pouvoir décrire les phénomènes de lixiviations entrant en jeu lors de l'exploitation d'uranium par ISR.

Chapitre 7

Proxys basés sur le transport et la récupération de traceurs en solution

7.1 Description du proxy

7.1.1 Objectif : prise en compte du comportement hydrodynamique des réalisations

On a vu dans le chapitre 6, que les descripteurs statiques des réalisations décrivent insuffisamment les réalisations pour les discriminer en terme de récupération d'uranium. En effet, la lixiviation in situ d'un gisement est un processus fortement impacté par la répartition des minéraux, dont l'uraninite, par rapport aux écoulements des fluides injecté et produit. La répartition de l'écoulement est d'abord essentielle dans l'apport de réactifs nécessaires à la dissolution de l'uraninite, et ensuite essentielles au transport de l'uranium dissous jusqu'aux puits producteurs. Pour représenter ces phénomènes, on peut s'inspirer des études faites dans l'industrie pétrolière et gazière en développant un proxy permettant d'évaluer le comportement dynamique des réalisations. Ce proxy doit permettre d'extraire de l'information quant à la répartition spatiale des teneurs en uranium vis-à-vis des lignes de courants reliant les injecteurs aux producteurs. Enfin, il doit permettre d'obtenir une première approximation de la production d'uranium.

Rappelons que dans les simulations de transport réactif, la majeure partie du temps de calcul est utilisée pour résoudre les équations non linéaires de la spéciation chimique du milieu, et pour faire converger la solution du transport avec celle de la spéciation. Le temps de calcul de l'écoulement et du transport sont beaucoup moins importants, même en considérant un écoulement transitoire et les effets gravitaires. Ainsi, on considère que le temps de calcul d'une simulation d'écoulement et de transport d'espèces non réactives par rapport au temps de calcul d'une simulation ISR-U est suffisamment faible pour qu'elle puisse être utilisée dans la phase de description. On se permet donc d'utiliser une simulation de transport de traceurs dans chaque réalisation comme proxy pour décrire chaque réalisation. L'écoulement est très sensible au changement de valeurs des propriétés à petite échelle. Le proxy permettra donc de discriminer dynamiquement les réalisations.

7.1.2 Répartition des traceurs utilisés

L'objectif est de mettre en place des traceurs permettant d'estimer les zones du réservoir drainées au cours de l'exploitation. Pour cela, on peut définir des traceurs en solution dans le réservoir à l'instant initial. Ces traceurs n'étant pas renouvelés, la quantité produite aux puits producteurs sera une estimation du volume de roches drainées. On peut même aller plus loin en différenciant les traceurs en solution en fonction du faciès géochimique OMR du voxel dans lequel les traceurs sont initialisés. Une distinction peut être apportée entre les voxels minéralisés de haute teneur et les voxels minéralisés de basse teneur. Rappelons que la distinction est donnée par le seuil tel que 75% des données minéralisées de puits soient qualifiées de basse teneur et 25% de haute teneur. Le seuil est donc constant entre les réalisations. Cette distinction est faite sur la base de l'expérience de modélisateurs en fonction de l'impact de cette échelle de teneur sur la production. Ainsi, à l'instant

initial, quatre traceurs différents sont en solution dans le réservoir : le traceur oxydé, le traceur réduit, le traceur basse teneur (TBT), et le traceur haute teneur (THT). Un traceur injecté constamment est aussi mis en place. La concentration arbitraire de ces traceurs est de 1 g/L.

Enfin, pour approcher au mieux l'ISR, l'écoulement dans le réservoir est simulé avec les mêmes contraintes que pour l'exploitation. La géométrie du champ de puits et les débits d'injection et de production sont ceux utilisés dans les simulations ISR-U. Les productions de traceurs au cours du temps peuvent être étudiées à l'échelle du bloc de la même manière que les productions d'uranium des simulations ISR-U. Les traceurs ne réagissent pas entre eux, et aucune espèce réactive n'est présente ni injectée dans le milieu.

7.1.3 Simulations de transport et de récupération de traceurs dans PB01 et PB02

Les cellules de production ont un débit de production constant dans le temps de $12 m^3/h$, et les débits d'injection sont ajustés pour respecter l'équilibre hydrique. Le champ de puits et la position des crépines sont les mêmes entre toutes les réalisations. Ainsi, les différences d'écoulement entre les réalisations ne sont dues qu'aux différences de positionnement des lentilles imperméables. Les résultats de production des traceurs ne seront donc dus qu'aux différences de répartition spatiale du faciès OMR et aux différences d'écoulement par rapport à ces faciès.

Les simulations de production de transport de traceurs sont effectuées dans les cent réalisations du bloc PB01 et du bloc PB02 durant 700 jours d'exploitation.

Tout comme la production d'uranium, les productions de traceurs au cours du temps peuvent être considérées en terme de production instantanée à l'échelle du bloc ou comme production cumulée. On peut observer sur les graphes de la figure 7.1 les productions cumulées et instantanées du traceur basse teneur dans les cent réalisations des deux blocs. Les productions des traceurs haute teneur, oxydé, et réduit présentent les mêmes caractéristiques.

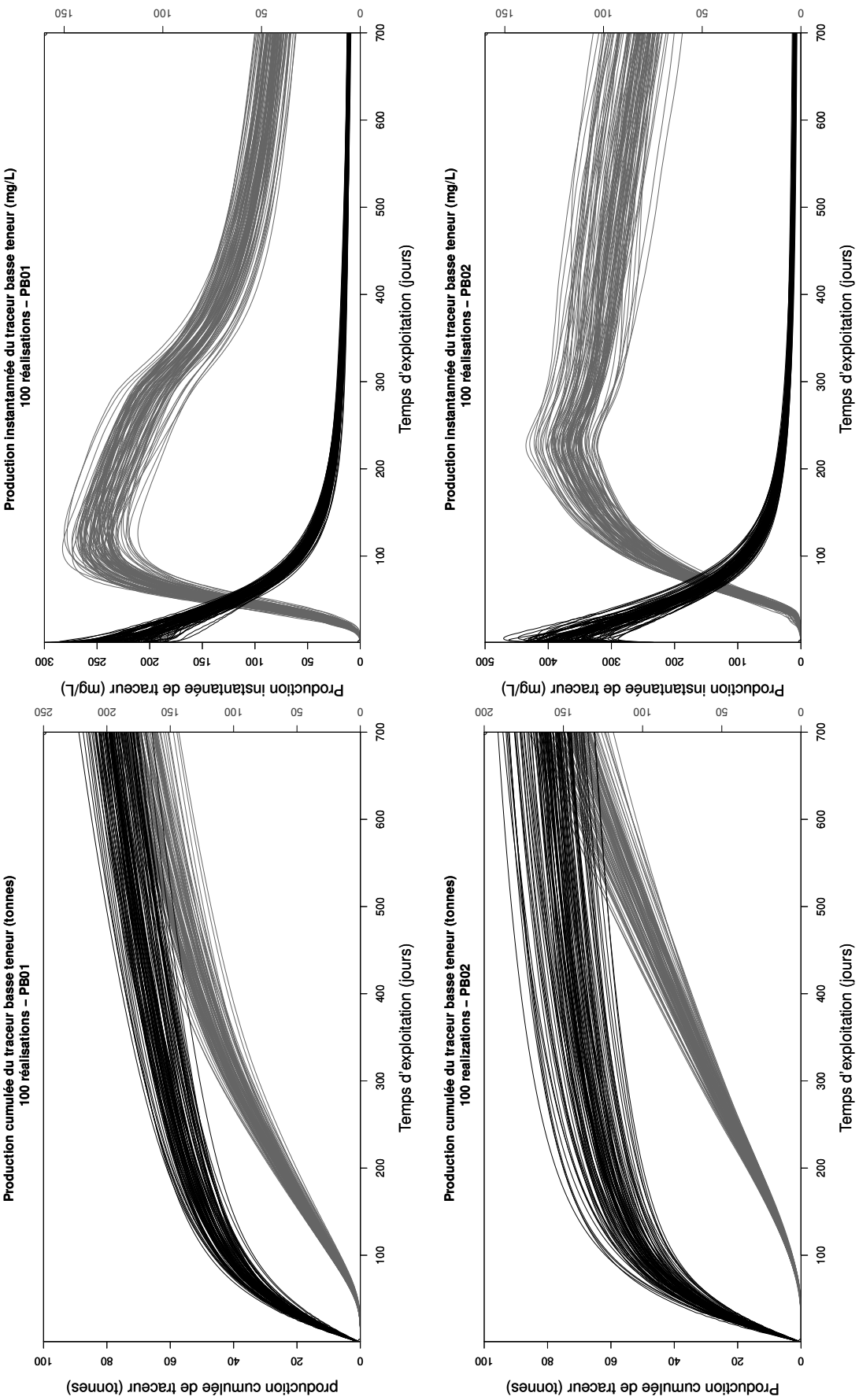

FIGURE 7.1 – *Courbes de production instantanée et cumulée du traceur basse teneur dans les cent réalisations de PB01 et PB02. Les courbes grisées et l'échelle de droite représente les productions d'uranium des cent réalisations*

En ce qui concerne les productions instantanées, on remarque tout d'abord la production immédiate des traceurs. En effet, le proxy ne prend pas en compte le temps de dissolution des minéraux stériles, et donc il n'y a pas le temps de latence correspondant à la phase d'acidification du réservoir entre le début de l'exploitation et la mise en circulation des espèces d'intérêt. De plus, les traceurs sont en solution à l'instant initial. Donc la mise en exploitation du champ de puits provoque le transport et la récupération immédiate des traceurs. La mise en solution n'est pas progressive comme le serait la mise en solution de l'uranium. L'absence de phase d'acidification et la mobilisation immédiate de l'ensemble des espèces provoquent le très rapide appauvrissement du réservoir. Le taux de récupération des traceurs dans les zones drainées tend rapidement vers 100%. En revanche, la production instantanée n'atteint pas 0 en raison des écoulements et transports très lents produisant des traceurs à partir de l'extérieur du bloc de production.

Vis-à-vis des productions cumulées de traceurs, on observe une plus grande variabilité des courbes sur le bloc PB02 que sur PB01. En revanche, pour les deux blocs, le plateau de production est très rapidement atteint.

Dans ce cas de simulation, on observe un gain très important de temps de calcul entre les traceurs et les simulations ISR-U. Ce gain provient de trois phénomènes :

- les simulations traceurs ont une durée d'exploitation de 700 jours, alors que les simulations ISR-U ont une durée d'exploitation de 1550 jours. À partir d'une certaine date, il n'y a plus d'apport d'information sur la variabilité de production des traceurs ;
- les espèces dans le milieu sont non-réactives, il n'y a donc pas besoin de résoudre le système d'équations chimiques non-linéaires dans chaque voxel, et il n'y a plus à faire converger le résultat du calcul du transport avec celui de la spéciation chimique.

Comme on peut l'observer pour les temps de calcul médian et moyen, l'absence de chimie fait gagner un temps de calcul d'un facteur 5 à 15. Le gain de temps est suffisant pour pouvoir considéréer les simulations de récupération de traceurs en solution comme un proxy utilisable dans la réduction de scénarios. La différence entre le temps de récupération pour PB01 et PB02 vient probablement de deux sources. Tout d'abord les réalisations de PB02 contiennent deux fois moins de mailles. De plus, une légère optimisation de l'écriture des résultats de simulation a permis de gagner du temps.

	Min (h)	Median (h)	Mean (h)	Max (h)
Simulation ISR-U PB01 (1550jours)	20	22.5	23.3	39.1
Simulation Traceurs PB01 (700jours)	0.95	3.8	3.4	8
Simulation ISR-U PB02 (1550jours)	10.5	13.6	13.8	31.9
Simulation Traceurs PB02 (700jours)	0.65	0.91	0.99	3.18

TABLE 7.1 – *Temps de calcul nécessaire pour chaque simulation ISR-U des blocs PB01 et PB02 pour cent réalisations*

7.2 Combinaisons de descripteurs pour la réduction de scénarios

7.2.1 Présentation de différentes combinaisons de descripteurs

L'utilisation de simulations d'écoulement et de transport de traceurs en solution permet d'obtenir des courbes de production au cours du temps. Ces courbes donnent de l'information sur le drainage par les puits producteurs du réservoir au cours de l'exploitation. Les courbes de production de tous ces traceurs au cours du temps représentent une grande quantité de données. Les trois sous-parties suivantes présentent trois manières d'utiliser les courbes de productions pour décrire les réalisations.

Utilisation des courbes complètes de production de traceurs

La première manière d'utiliser ces courbes est de les utiliser pour calculer entre chaque paire de réalisations {x, x'} directement la distance euclidienne : $\sqrt{\sum_i (x_i - x'_i)^2}$. Dans le cas des traceurs comme dans le cas de l'uranium, on considère la valeur de la production chaque jour comme une

coordonnée i de la réalisation. Afin de déterminer quelles sont les courbes les plus intéressantes pour discriminer les réalisations en terme de récupération de l'uranium, on compare les distances calculées sur les courbes de traceurs, avec les distances calculées sur les courbes d'uranium. La comparaison se fait grâce à la corrélation entre les deux distances pour l'ensemble des paires de réalisations. Ainsi, cela permettra de détecter les courbes de traceurs les plus intéressantes pour discriminer les réalisations.

Les résultats des corrélations sont présentées dans les tableaux 7.2 et 7.3. On distingue les productions instantanées et cumulées afin de ne pas risquer de masquer de l'information. On observe que très peu de corrélation entre les distances calculées sur la production d'uranium et celles calculées sur les récupérations de traceurs. Cependant, le traceur haute teneur semble avoir une corrélation un peu meilleure, même si celle-ci reste faible.

Production cumulée	*Traceur oxydé*	*Traceur réduit*	*Traceur injecté*	*Traceur basse teneur*	*Traceur haute teneur*
Uranium	0.01	0.02	-0.07	-0.03	0.27

TABLE 7.2 – *Corrélations entre les distances calculées pour chaque paire de réalisations sur les courbes cumulées de production d'uranium et les distances calculées sur les courbes de productions cumulées de traceurs*

Production instantanée	*Traceur oxydé*	*Traceur réduit*	*Traceur injecté*	*Traceur basse teneur*	*Traceur haute teneur*
Uranium	0.03	0.11	-0.1	-0.06	0.43

TABLE 7.3 – *Corrélations entre les distances calculées pour chaque paire de réalisations sur les courbes de production instantanées d'uranium et les distances calculées sur les courbes de productions instantanées de traceurs*

L'information obtenue par ces courbes n'est pas suffisamment reliée à la production d'uranium pour utiliser directement les courbes dans la réduction de scénarios.

Quelques tests ont été effectués pour tenter de synthétiser l'information contenue dans les courbes de production de traceurs à l'aide d'analyses en composantes principales (ACP). Les composantes principales calculées ont été utilisées comme descripteurs des réalisations. Cependant, les résultats ne furent pas concluant puisqu'aucun apport d'information n'est effectué par l'ACP. Il n'y a pas d'amélioration de la discrimination des réalisations.

Extraction de descripteurs scalaires

Afin de simplifier l'étude, et puisque qu'aucun descripteur pertinent ne semble pouvoir être obtenu à partir des productions des traceurs injectés, oxydés et réduits, nous les négligerons par la suite. Parmi les courbes des traceurs haute teneur (THT) et basse teneur (TBT), on peut s'intéresser à différentes valeurs. Ces valeurs sont ce qui pourrait le plus se rapprocher de descripteurs de l'exploitation par ISR de l'uranium. Pour les productions de TBT et THT, on extrait trois valeurs

différentes : la masse totale de traceur extraite de la réalisation, la concentration produite en fin de simulation du traceur, et la concentration maximale de traceur que l'on arrive à produire au pic. On pourrait imaginer extraire un descripteur donnant la date d'arrivée du pic de production de traceur, mais comme on le voit sur les courbes de la figure 7.1, la date du pic de production des traceurs est le premier jour et n'est donc pas intéressante. La corrélation de ces six descripteurs de la production de traceur sur PB01 est calculée avec les descripteurs équivalents sur la production d'uranium. Les résultats sont montrés dans le tableau 7.4. On observe dans ce tableau que parmi tous ces descripteurs, seuls deux présentent une corrélation relativement intéressante. Les autres descripteurs calculés sur les productions de traceurs ne présentent pas de corrélation avec les descripteurs équivalents d ela production d'uranium. On ne conserve donc que deux descripteurs des productions : 1) la masse de THT produite en fin de simulation, et 2) la concentration de THT maximale produite au cours de la simulation.

	Corrélation du descripteur avec son équivalent uranium
Production cumulée finale THT	0.67
Production cumulée finale TBT	0.11
Production instantanée finale THT	0.22
Production instantanée finale TBT	0.03
Production instantanée max THT	0.56
Production instantanée max TBT	0.35

TABLE 7.4 – *Corrélations entre les descripteurs calculés sur les courbes THT et TBT et leurs équivalents calculés sur la production d'uranium*

7.2.2 Obtention d'une combinaison efficace

Désormais, on peut chercher une combinaison de descripteurs efficaces pour discriminer les réalisations. Pour cela on utilise à la fois les descripteurs statiques et les descripteurs utilisant la production du THT. De même que dans le chapitre 6 sur les descripteurs statiques, p.67, on réutilisera les quatre descripteurs utilisés pour synthétiser la variabilité de la production lors de la propagation directe : 1) la masse totale d'uranium produite, 2) la concentration en fin de vie du bloc, 3) la date d'arrivée du pic de production et 4) l'amplitude du pic de production. Ces descripteurs permettent de calculer une distance entre toutes les paires de réalisations. On comparera ensuite cette distance de référence avec la distance calculée d'après une certaine combinaison de descripteurs en regardant la corrélation entre les distances pour chaque paire de réalisations.

Différentes combinaisons testées sont présentées dans le tableau 7.5. Dans ce tableau, chaque ligne correspond à la combinaison des descripteurs dont la case est en verte. Les descripteurs dont la cellule est en rouge dans la ligne ne sont pas utilisés dans la combinaison. La dernière cellule donne la valeur de la corrélation entre les distances calculées sur les descripteurs et les distances de référence. Ces résultats nous montrent d'abord que l'utilisation des deux nouveaux descripteurs dans les combinaisons améliore la corrélation entre les distances de référence et les distances calculées d'après les descripteurs. Ensuite, comme le montre le tableau 7.4, les descripteurs statiques dont le calcul se base sur les basses teneurs ne sont pas intéressants. Ainsi, il vaut mieux ne pas utiliser le tonnage dans les basses teneurs, le volume des basses teneurs, ou une proportion entre les hautes et basses teneurs.

En conclusion, la combinaison de descripteurs retenue utilise les descripteurs suivants :

- le tonnage total d'uranium sous le bloc ;
- le tonnage d'uranium dans les voxels à haute teneur uniquement ;
- le volume total de minéralisation sous le bloc ;
- le volume minéralisé des voxels à haute teneur ;
- la masse de traceur haute teneur produite en fin de simulation ;
- la concentration maximale produite au cours de la simulation ;
- la proportion de voxels hautes teneurs par rapport à tous les voxels minéralisés.

Tonnage total	*Tonnage hautes teneurs*	*Tonnage basses teneurs*	*Volume total*	*Volume hautes teneurs*	*Volume basses teneurs*	*Proportion hautes teneurs*	*Proportion basse teneur*	*Masse THT produite*	*Concentration max THT*	*Corrélation des distances*
■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	0.56
■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	0.55
■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	0.53
■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	0.54
■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	0.56
■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	0.55
■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	0.52
■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	0.57
■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	0.55
■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	0.55
■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	0.60

TABLE 7.5 – *Évaluation de la qualité des combinaisons de descripteurs statiques et de traceurs à l'aide de la corrélation avec une distance de référence. L'introduction des descripteurs la production d'uranium montre une significative amélioration de la corrélation vis-à-vis du chapitre 6. Les tests montrent que les combinaisons utilisant des descripteurs avec les basses teneurs sont moins efficaces pour reproduire la distance de référence entre les réalisations. On arrive finalement à une corrélation maximale de 0.60, qui reste cependant assez faible*

Dans la partie suivante, la combinaison retenue est appliquée dans la réduction de scénarios de PB01. Ensuite, la robustesse de la combinaison est testée lors de son application dans la réduction de scénarios sur PB02.

7.3 Résultats de réduction de scénarios

7.3.1 Réduction de scénarios sur PB01

Tout d'abord, afin de réduire l'espace des descripteurs et de faciliter la visualisation, on applique le Multi-Dimensional Scaling. La figure 7.2 présente la variance cumulée portée par les composantes principales extraites. Les deux premières composantes principales expliquent 84.6% de la variance des données. Le partitionnement par k-médoïdes est fait dans l'espace à deux dimensions défini par les deux premières composantes principales.

Afin de déterminer le nombre de familles de réalisations à construire, on étudie l'évolution du coefficient de silhouette sur plusieurs partitionnements, en faisant varier le nombre de k de familles de réalisations. Le résultat est donné sur le graphique 7.3. Le meilleur nombre de familles à utiliser selon l'évolution du coefficient de silhouette est fonction du temps de calcul que l'on cherche à minimiser, et de la qualité du partitionnement donné par les silhouettes. Pour $k = 10$, le coefficient de silhouette est élevé et se distingue particulièrement des cas ayant moins de clusters. C'est pour cela que l'on choisit d'effectuer la réduction de scénarios avec ce nombre de médoïdes.

Les simulations ISR-U sont calculées dans les réalisations sélectionnées lors du partitionnement par k-médoïdes, avec $k = 10$. Chacune des réalisations représentatives est pondérée par la proportion de réalisations dans sa famille. Les productions simulées de ces réalisations et leur pondération permettent d'obtenir une quantification d'incertitude approchée, que l'on représente par les courbes P_{10}, P_{50} et P_{90}. La quantification d'incertitude faite par ces trois courbes est comparée à celle

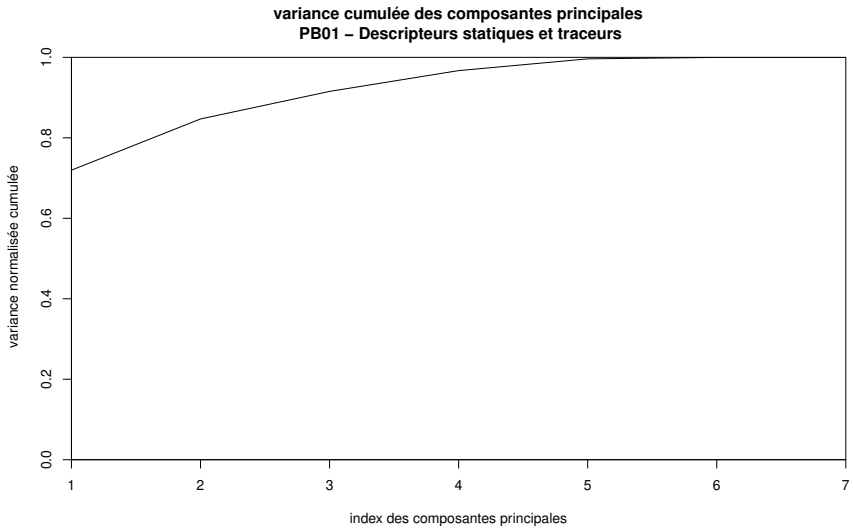

FIGURE 7.2 – *Variance cumulée portée par les composantes principales du MDS sur la combinaison de descripteurs statiques et de récupération de traceurs des réalisations du bloc PB01. Les deux premières composantes expliquent 84.6% de la variance des réalisations*

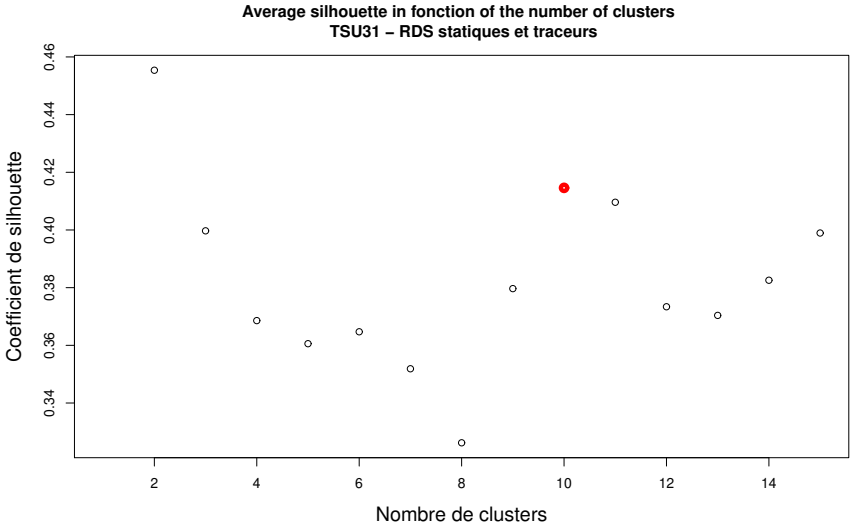

FIGURE 7.3 – *Coefficient de silhouette des réalisations en fonction du nombre de clusters après le partitionnement des réalisations de PB01 avec les descripteurs statiques et de récupération de traceurs. Dans ce cas ci, on choisira de sélectionner 10 réalisations représentatives*

effectuée lors de la propagation directe.

La comparaison est montrée figure 7.4. Les résultats sont particulièrement concluant pour la production cumulée avec un écart minime pour la production finale médiane. Pour la production instantanée, l'enveloppe d'incertitude de la concentration en fin d'exploitation est très bien représentée, tout comme la concentration médiane. En revanche, la concentration du pic de production de la courbe P_{10} sur-estime un peu l'incertitude. Cependant, la combinaison de descripteurs construite grâce à PB01 présente globalement une bonne qualité d'approximation de la quantification d'incertitude. Afin de tester sa robustesse, cette combinaison est testée lors d'une réduction de scénarios sur PB02.

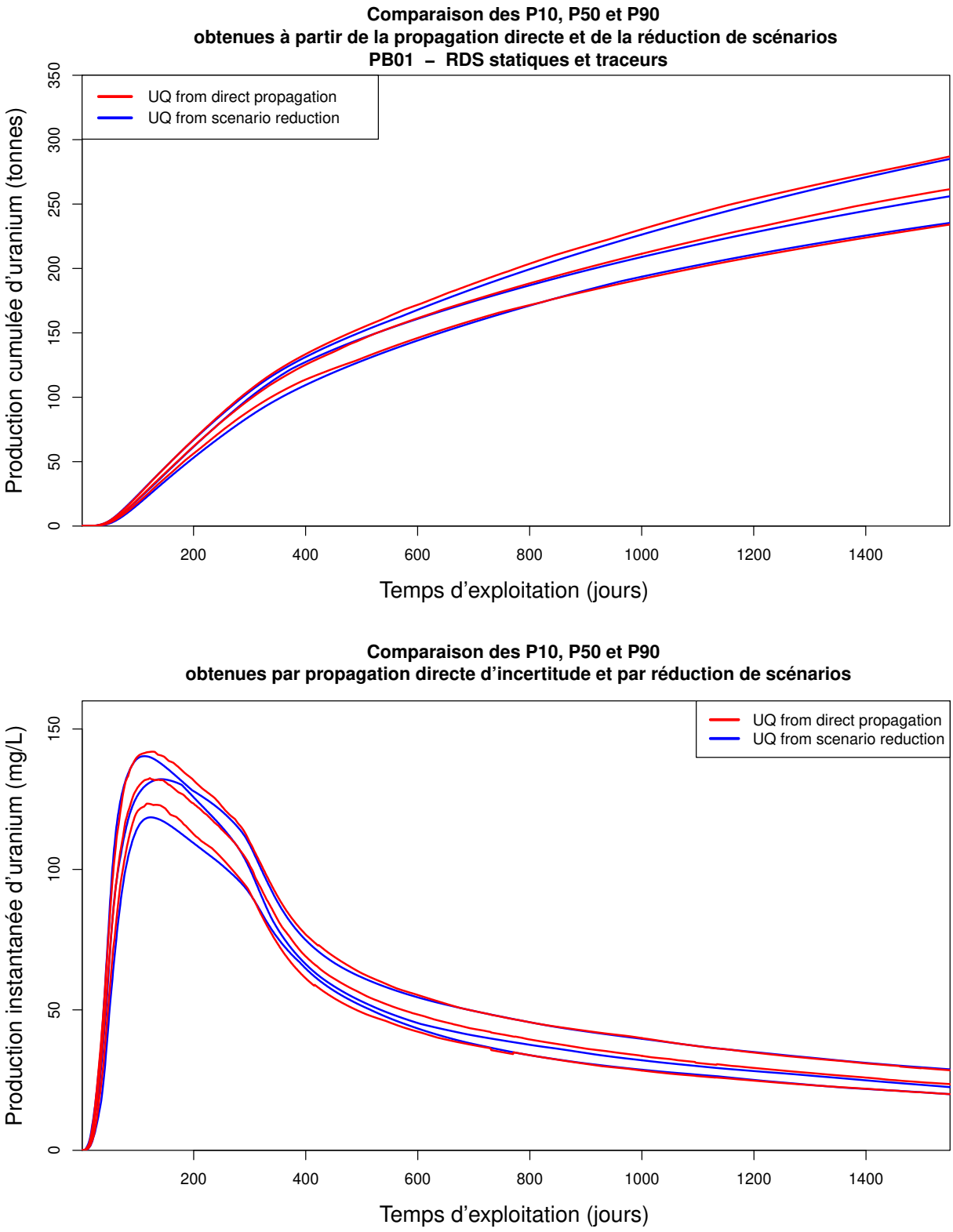

FIGURE 7.4 – *Comparaison de la quantification d'incertitude de référence et celle approchée par la réduction de scénarios utilisant les descripteurs statiques et de récupération de traceurs sur PB01. Les courbes P_{10}, P_{50} et P_{90} de référence sont globalement bien approchées par celles obtenues par réduction de scénarios. On peut remarquer cependant deux écarts : un écart minime sur la masse d'uranium médiane produite en fin d'exploitation, et une sous-estimation de l'amplitude du pic de production au P_{10}.*

7.3.2 Validation sur PB02

PB02 sert à valider la robustesse de la combinaison de descripteurs en l'appliquant sur un bloc de production avec une géométrie de champ de puits différente, une géologie différente, et une discrétisation spatiale plus grossière.

Pour chacune des réalisations, de même que pour PB01, on calcule la combinaison des cinq descripteurs statiques et des deux descripteurs de la production du traceur haute teneur. Cette description est ensuite réduite à l'aide d'un MDS dont la variance cumulée des composantes principales est présentée sur le graphique 7.5. Les deux premières composantes principales expliquent 92.4% de la variance du jeu de données. On va donc effectuer le partitionnement des réalisations dans l'espace réduit à deux dimensions.

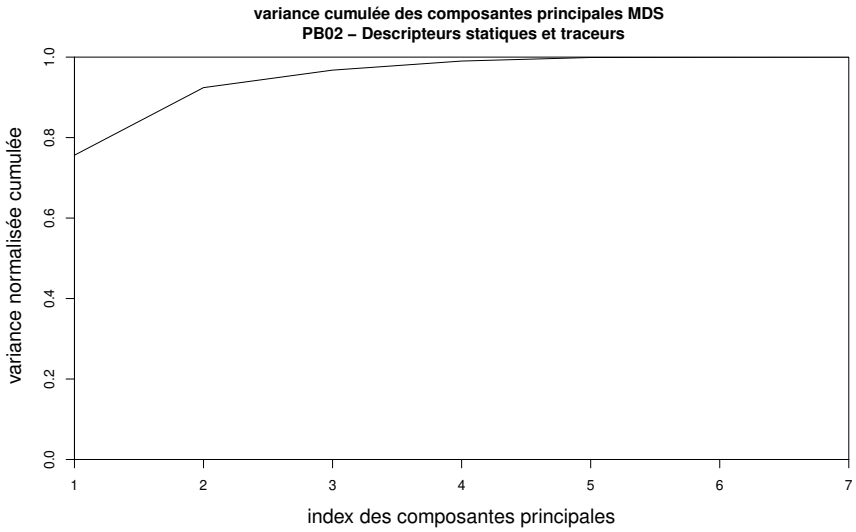

FIGURE 7.5 – *Variance cumulée portée par les composantes principales du MDS sur les descripteurs statiques des réalisations du bloc PB02. Les deux premières composantes expliquent 92.4% de la variance des réalisations*

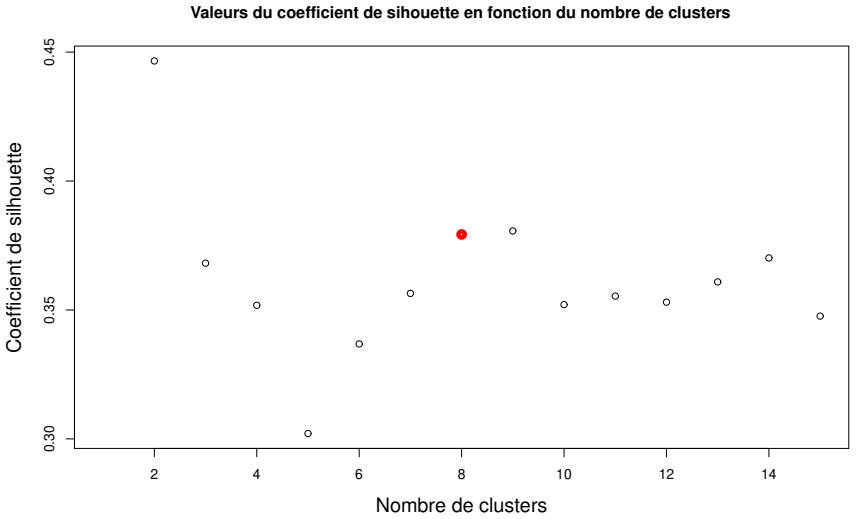

FIGURE 7.6 – *Silhouettes moyennes des réalisations en fonction du nombre de clusters après le partitionnement des réalisations de PB02 avec les descripteurs statiques et traceurs. Dans ce cas ci, on choisira de sélectionner 8 réalisations représentatives*

Afin de déterminer le nombre de réalisations représentatives à considérer pour la réduction de scénarios, le partitionnement est fait pour un nombre variable de médoïdes, et le coefficient de

silhouette est calculé à chaque fois. La figure 7.6 présente les valeurs obtenues. Lorsque l'on cherche les plus fortes valeurs de silhouette, les partitionnements à 8 ou 9 médoïdes sont sensiblement les mêmes. Les deux cas ont été testés dans le cadre de la thèse, et montrent des résultats similaires. Dans un cadre opérationnel, on cherchera à limiter le nombre de simulations ISR-U à calculer. Le cas à huit médoïdes est donc retenu.

Dans chacune des huit réalisations sélectionnées lors du partitionnement, une simulation ISR-U est effectuée. Avec la pondération des réalisations, on peut reconstituer les courbes de quantification d'incertitude P_{10}, P_{50} et P_{90}. Ces trois courbes approchées par réduction de scénarios sont comparées avec celles obtenues par propagation directe d'incertitude sur la figure 7.7.

On observe sur le graphe des productions cumulées que les courbes P_{50} et P_{90} approchées ne s'ajustent pas du tout aux courbes de référence. Sur le graphe des productions instantanées l'enveloppe approchée par les courbes P_{10} et P_{90} obtenues par réduction de scénarios sous-estiment l'enveloppe des courbes de référence au niveau du pic de production et au niveau de la concentration en fin de vie du bloc. Les résultats de la quantification d'incertitude approchée par les réalisations sélectionnées d'après les proxys statiques et par récupération de traceurs montrent que cette description n'est pas suffisamment efficace. Les proxys utilisés et leurs résultats ne permettent pas de décrire les réalisations en terme de production d'uranium.

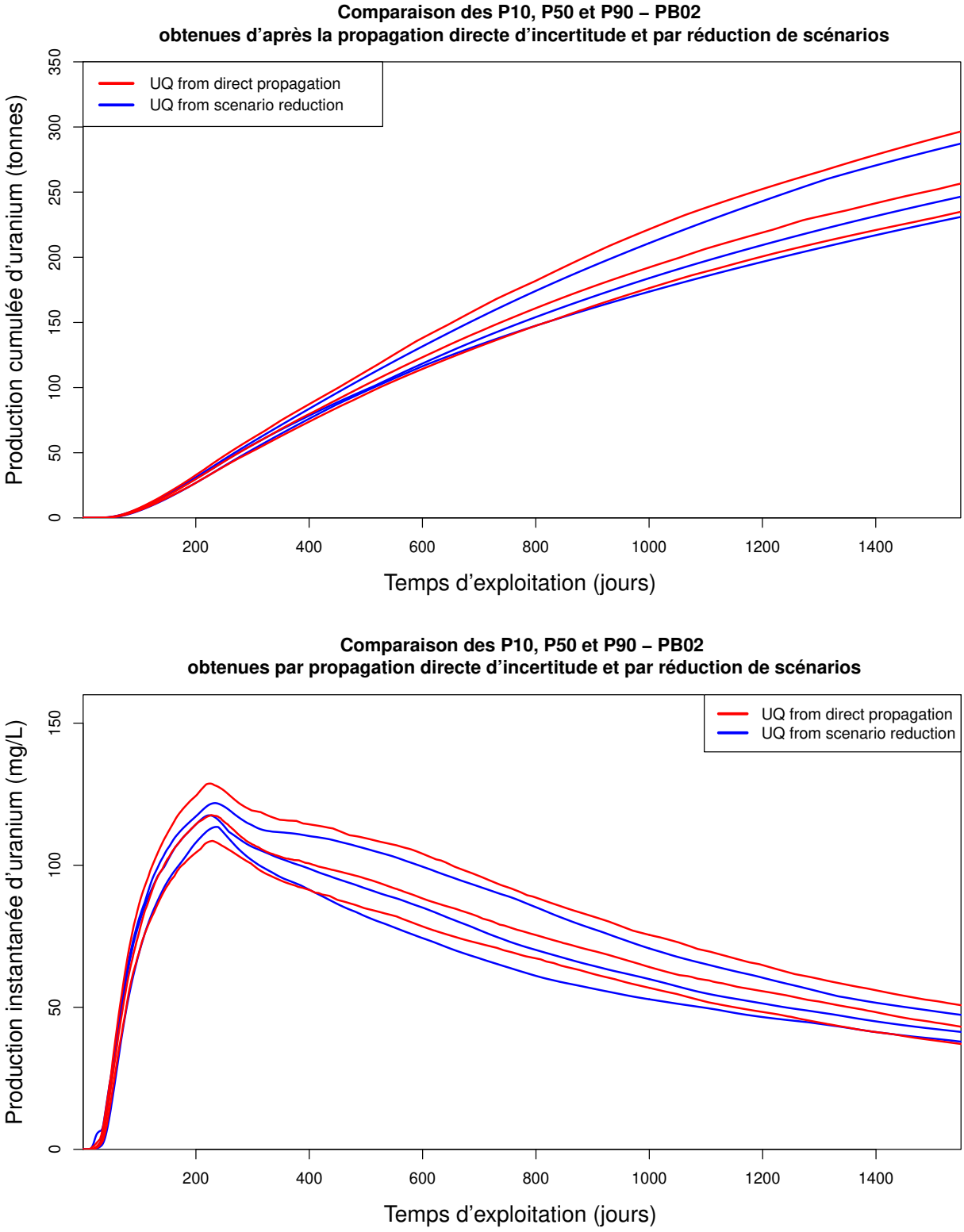

FIGURE 7.7 – *Comparaison de la quantification d'incertitude de référence et celle approchée par la réduction de scénarios utilisant les descripteurs statiques et de récupération de traceurs sur PB02. On observe sur le premier graphe, que les courbes P_{50} et P_{90} approchées ne s'ajustent pas du tout aux courbes de références. Sur le deuxième graphe, l'enveloppe approchée par les courbes obtenues par réduction de scénarios sous-estiment l'enveloppe des courbes de référence*

7.4 Conclusion sur l'utilisation conjointe de proxys statiques et d'un proxy de récupération de traceurs

L'objectif est de décrire le comportement hydrodynamique des réalisations afin de pouvoir mieux les discriminer sur leur capacité à lixivier l'uraninite. Pour cela, une simulation d'écoulement et de récupération de traceurs est calculée dans chaque réalisation. La récupération d'un traceur en solution dans le réservoir à l'instant initial dans les voxels à haute teneur en uranium semble efficace. Les résultats montrent que l'utilisation conjointe de descripteurs statiques et de descripteurs calculés sur les courbes de récupération du traceur haute teneur améliore le calcul des distances entre les réalisations sur PB01.

L'augmentation du temps de calcul de la phase de description des réalisations s'accompagne d'un gain de qualité de la description. Cependant, le test de robustesse de la combinaison en l'appliquant à PB02 ne montre pas de résultats concluants. Les réalisations sélectionnées sont incapables d'approcher correctement les P_{10}, P_{50} et P_{90} de référence.

Ce problème provient probablement de plusieurs sources. Tout d'abord, les descripteurs statiques ne permettent pas de décrire le comportement hydrodynamique des réalisations. De plus, les descripteurs calculés sur la récupération de traceurs ne peuvent donner qu'une idée du drainage du réservoir par les puits producteurs. Il n'y a pas de variation de la concentration en traceur à l'initialisation en fonction de la teneur en uranium du voxel. Un autre phénomène non représenté est la mise en solution de l'élément chimique, et plus particulièrement son aspect temporel. Ni le proxy statique ni le proxy par récupération de traceurs n'arrive à suffisamment bien approcher les phénomènes impliqués dans l'ISR pour approcher la récupération d'uranium des réalisations. Il est donc nécessaire de construire un proxy capable d'approcher la mise en solution de l'uranium pour pouvoir décrire et discriminer efficacement les réalisations. Cette voie est explorée dans le chapitre suivant.

Chapitre 8

Proxys basés sur la dissolution, le transport et la récupération d'un minéral traceur

8.1 Lixiviation d'un traceur minéral

8.1.1 Objectifs

Les études sur les proxys statiques et la récupération de traceurs dissous dans le réservoir à l'instant initial ont montré que les descripteurs que l'on peut en tirer ne permettent pas d'obtenir une approximation fiable des enveloppes d'incertitudes, notamment sur le bloc de validation PB02. Il est donc nécessaire de développer un proxy prenant à la fois en compte l'écoulement dans le réservoir, mais aussi l'impact de l'hétérogénéité spatiale sur la dissolution.

La vitesse de réaction d'un élément i peut être formalisée selon l'équation 8.1. La vitesse de lixiviation de l'uraninite est impactée par plusieurs facteurs. Le premier est la vitesse d'apport en réactif jusqu'à l'uranium minéralisé. Si l'uraninite se concentre sur le trajet des lignes de courant à haute vélocité, l'apport en réactif est important et n'est pas une limitation de la réaction. Le deuxième facteur correspond à la surface réactive globale de l'uraninite. Plus l'uraninite est dispersée, plus la surface de contact entre le fluide de l'aquifère et le minéral est importante, et donc plus sa vitesse de dissolution peut augmenter. Ce facteur est impacté par la surface spécifique du minéral. Le troisième facteur provient de la présence d'espèces catalysatrices dans le milieu, tel que la présence de proton.

$$\frac{\mathrm{d}C_i}{\mathrm{d}t} = kS(\frac{Q}{K} - 1)C_j^{\alpha} \tag{8.1}$$

avec :

k la constante cinétique de réaction ($\mathrm{mol/m^2/s}$),

S la surface spécifique ($\mathrm{cm^2/g}$),

K la constante d'équilibre,

Q le produit d'activité ionique,

α le coefficient de catalyse de la réaction par l'élément j.

Il faut donc chercher à construire un proxy capable de représenter les phénomènes de vitesse de lixiviation et de répartition spatiale des propriétés. Pour cela, il est nécessaire d'utiliser une simulation de transport réactif à l'étape de description. Ainsi, on étudie dans la partie suivante deux manières d'utiliser un minéral et sa dissolution au cours de l'exploitation comme proxy des simulations ISR-U.

8.1.2 Lixiviation d'un minéral traceur

Afin de construire un proxy capable d'approcher la lixiviation de l'uraninite, on va considérer l'exploitation d'un minéral factice par ISR dans chaque réalisation. Le proxy obtenu va être simulé dans la phase de description de chaque réalisation. Ainsi, l'objectif est de construire un minéral

suffisamment pertinent pour approcher la lixiviation de l'uranium, mais avec une chimie suffisamment simple pour que le temps de simulation de son exploitation soit court.

Plusieurs idées vont contribuer au respect de ces contraintes :

- un seul composant de base constitue la base de donnée du modèle géochimique, CB_T ;
- seules deux espèces sont considérées dans le milieu :
  - la forme solide du traceur $\mathrm{T}_{(sol)}$ constituée d'un CB_T ;
  - la forme aqueuse du traceur $\mathrm{T}_{(aq)}$ aussi constituée d'un CB_T
- le traceur sous forme solide possède la même répartition spatiale que l'uraninite et la même teneur ;
- la surface spécifique du minéral traceur est la même que celle de l'uraninite : 500 cm^2/g ;
- la masse molaire du minéral traceur est la même que celle du dioxyde d'uranium : 270 g/mol.

On distingue deux contrôles différents de la dissolution du minéral.

Minéral traceur hydrodynamique

Le premier cas correspond à un traceur dont la dissolution est instantanée, mais dont la quantité de minéral dissous lors du pas de temps est limitée par une concentration maximale de traceur dissous. La valeur de la concentration maximale est donnée par la constante de réaction de la dissolution du traceur :

$$\mathrm{T}_{hydro\ (sol)} \rightleftharpoons \mathrm{T}_{hydro\ (aq)} \tag{8.2}$$

$$K = \frac{1}{[\mathrm{T}_{hydro\ (aq)}]}\ \text{, si } \mathrm{T}_{hydro\ (sol)} > 0 \tag{8.3}$$

Afin de choisir une valeur de constante de dissolution K qui soit effectivement une contrainte sur la dissolution du traceur, on émet l'hypothèse que cette concentration maximale est la concentration standard d'uranium produite au pic de production dans les simulation ISR-U. Cette concentration standard d'uranium dissous au pic est donnée par nos propres simulations et par l'expérience des modélisateurs. On la définit comme égale à 150 mg/L d'UO_2. Il peut être judicieux, dans le cas où l'on applique la réduction de scénarios sur des blocs dont la géologie est fortement différente de PB01 ou PB02, de simuler l'ISR d'un bloc jusqu'au pic de production pour vérifier que l'on est proche de cette valeur. Le code de transport réactif Hytec utilise la valeur Logarithmique de la constante de dissolution. Sa valeur est donc Log$K$=3,2. La constante de dissolution de l'uraninite est de Log$K$=4,8 à 25 degrés Celsius (température du réservoir).

Ainsi, la lixiviation du minéral traceur est contrôlée par l'hydrodynamisme dans le réservoir qui va transporter le traceur une fois celui-ci dissous. En d'autre termes, la lixiviation est contrôlée par la capacité du champ de puits à créer un courant rapide dans les zones riches en minéral "traceur hydrodynamique". La production du traceur hydro du bloc représentera donc la répartition du traceur sur le trajet des écoulements partant des puits injecteurs aux puits producteurs en respect de sa constante de dissolution.

Minéral traceur cinétique

La deuxième manière de contrôler la dissolution du minéral traceur est cinétique. La dissolution de l'uraninite n'est pas instantanée. On développe donc un minéral traceur soumis à deux contraintes de dissolution simultanées. La première est la même que pour le traceur hydrodynamique :

$$\mathrm{T}_{cinet\ (sol)} \rightleftharpoons \mathrm{T}_{cinet\ (aq)} \tag{8.4}$$

La deuxième contrainte concerne la cinétique de dissolution. La vitesse de dissolution de l'uraninite est contrainte par une constante de vitesse de réaction, un écart à l'équilibre, et un effet catalyseur par la concentration en ions H^+. Les constantes de l'équation de réaction de dissolution de l'uraninite 8.1 sont : $k = -3,2.10^{-8}$ mol/m^2/s et $\alpha = 0,37$. D'après les experts, le pH moyen auquel se dissous l'uraninite au cours de l'exploitation est de $pH = 1,8$. Afin de ne pas introduire

d'espèces chimiques supplémentaire dans le milieu, l'effet catalyseur des protons est intégré à la valeur de la constante de vitesse de réaction en considérant que le pH est uniforme et constant dans tout le réservoir au cours de l'exploitation du traceur. On obtient donc pour le contrôle cinétique de la dissolution du minéral traceur cinétique $k_{synthetique} = -6,9.10^{-9}$ mol/m^2/s :

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{T}_{cinet\ (sol)}]}{\mathrm{d}t} \ = \ kS[\mathrm{H}^+]^{\alpha}(\frac{Q}{K}-1) \ = \ k_{synthetique}S(\frac{\frac{1}{[\mathrm{T}_{cinet\ (aq)}]}}{K}-1) \tag{8.5}$$

Q est le quotient de réaction. Le terme $(\frac{Q}{K}-1)$ correspond au facteur d'écart à l'équilibre dans la cinétique de réaction. La lixiviation du traceur cinétique est contrôlée par la même constante d'équilibre que le traceur hydro, mais avec en plus une constante cinétique similaire à celle de l'uraninite à pH=1,8.

8.2 Simulations des deux proxys dans PB01 et PB02

Pour comparer la lixiviation du traceur hydro et la lixiviation du traceur cinétique, les deux proxys sont simulés dans les cent réalisations des blocs PB01 et PB02. Les valeurs de la constante d'équilibre et de la constante cinétique sont identiques pour les deux blocs.

Les conditions de simulations sont les mêmes que pour les simulations ISR-U telles que présentées dans le chapitre 5, et notamment : géométrie de champ de puits et débits imposés. Ainsi les résultats de production de traceurs seront comparables avec les résultats de production d'uranium. Les simulations de traceurs sont faites pour 1550 jours d'exploitation.

8.2.1 Dissolution rapide à l'équilibre du minéral traceur

Les courbes de production du traceur hydro sont présentées en noir sur les graphes de la figure 8.1. Les courbes grises en arrière plan sont les profils des courbes de production d'uranium des cent réalisations, avec leur échelle sur la gauche du graphique. Les courbes de production cumulée d'uranium étant très similaires aux courbes de production de traceur, celles-ci ne sont pas représentées dans un soucis de lisibilité.

Les courbes de production instantanées de traceur présentent une évolution bien plus similaire à la production d'uranium que les courbes de production des traceurs en solution à l'instant initial. Tout d'abord, on observe un pic de production clair sur la courbe de chaque réalisation. La mobilisation du traceur est bien contrainte. On peut donc espérer que le proxy reproduise efficacement la dissimilarité entre les réalisations vis-à-vis de la date d'arrivée et l'amplitude du pic de production d'uranium des réalisations. De plus, on observe une diminution graduelle de la concentration produite au cours du temps. Cette diminution traduit l'appauvrissement continu du gisement lors de la lixiviation du traceur. Les valeurs de concentration de traceur produit en fin de simulation semblent converger vers les concentrations d'uranium produit. De même on peut supposer que la dissimilarité est bien reproduite par les résultats du proxy.

Il est cependant nécessaire de remarquer que le proxy ne reproduit pas la phase d'acidification de l'exploitation durant laquelle le bloc ne produit pas d'uranium. De plus, les courbes de production instantanée ne sont pas lisses. Étant donné la dissolution instantanée du traceur, la dissolution complète du traceur dans les voxels est brutal, et visible sur les courbes. Ce phénomène est peu réaliste.

Le traceur hydro semble reproduire un nombre conséquent de comportement de l'exploitation.

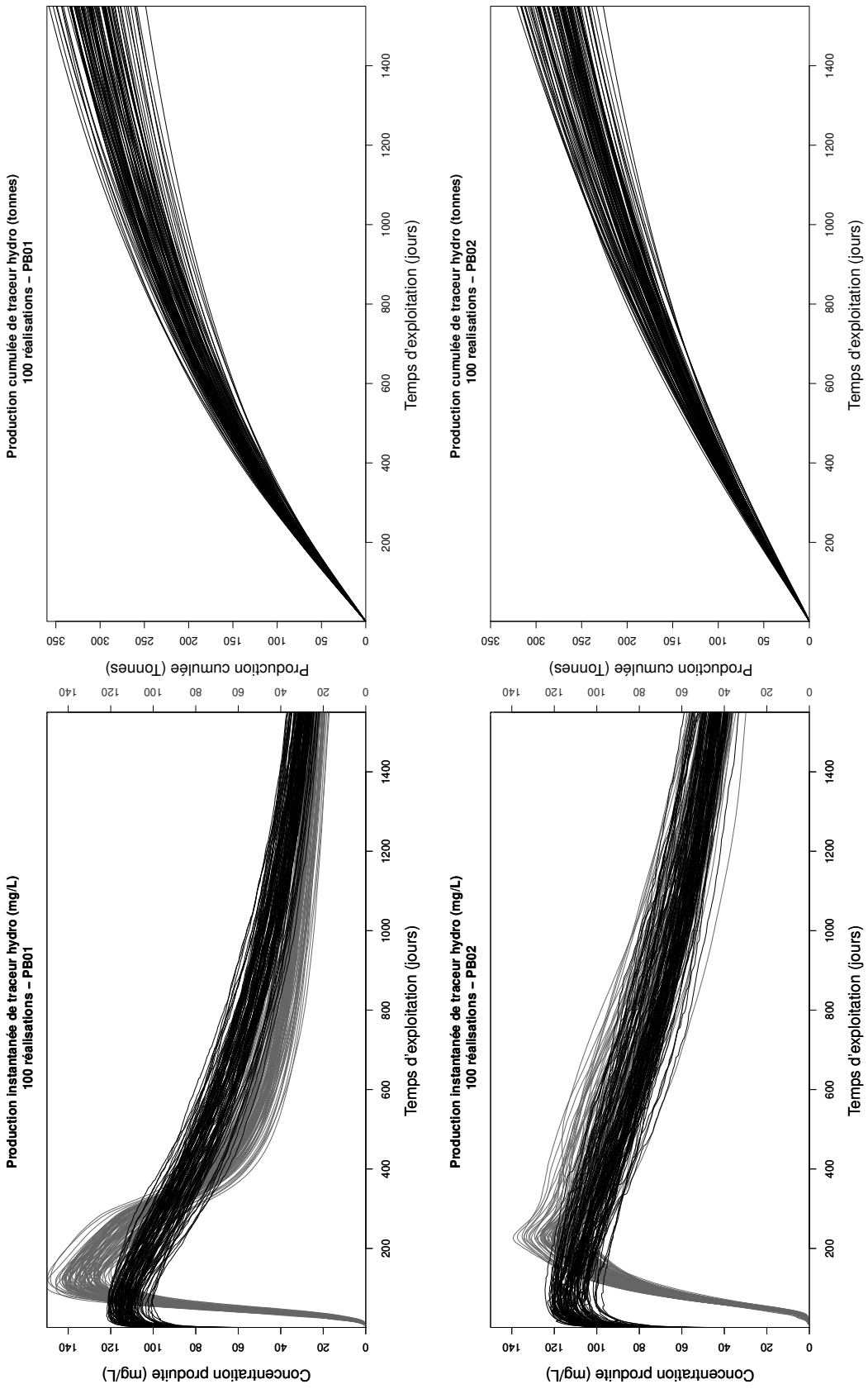

FIGURE 8.1 – *Graphiques des productions cumulées et instantanées du traceur hydro des cent réalisations de PB01 et PB02. On observe un pic de production distinct et une diminution de la concentration en traceur hydro produit traduisant un appauvrissement graduel réaliste du gisement. Les courbes grises représentent la production instantanée d'uranium*

8.2.2 Dissolution avec cinétique du minéral traceur

Les courbes de production du traceur cinétique sont présentées figure 8.2, ainsi que les courbes de production instantanée d'uranium. Les courbes de production cumulée de traceur sont très similaires aux courbes de production d'uranium, avec un simple décalage dû à la durée de la phase d'acidification qui n'est pas représenté par les simulations de récupération du traceur cinétique. Les courbes de production instantanée du traceur cinétique, quant à elles, ont un pic de production clairement identifié lors de l'exploitation du traceur. De plus, la concentration diminue lentement et sans à-coup au cours du temps, traduisant un appauvrissement progressif du gisement similaire à la production d'uranium. La contrainte cinétique de dissolution temporise la mobilisation du traceur et donc amortit la fin de dissolution des voxels minéralisés.

De même que le traceur hydro, la production du traceur cinétique semble être représentative de la production de l'uranium.

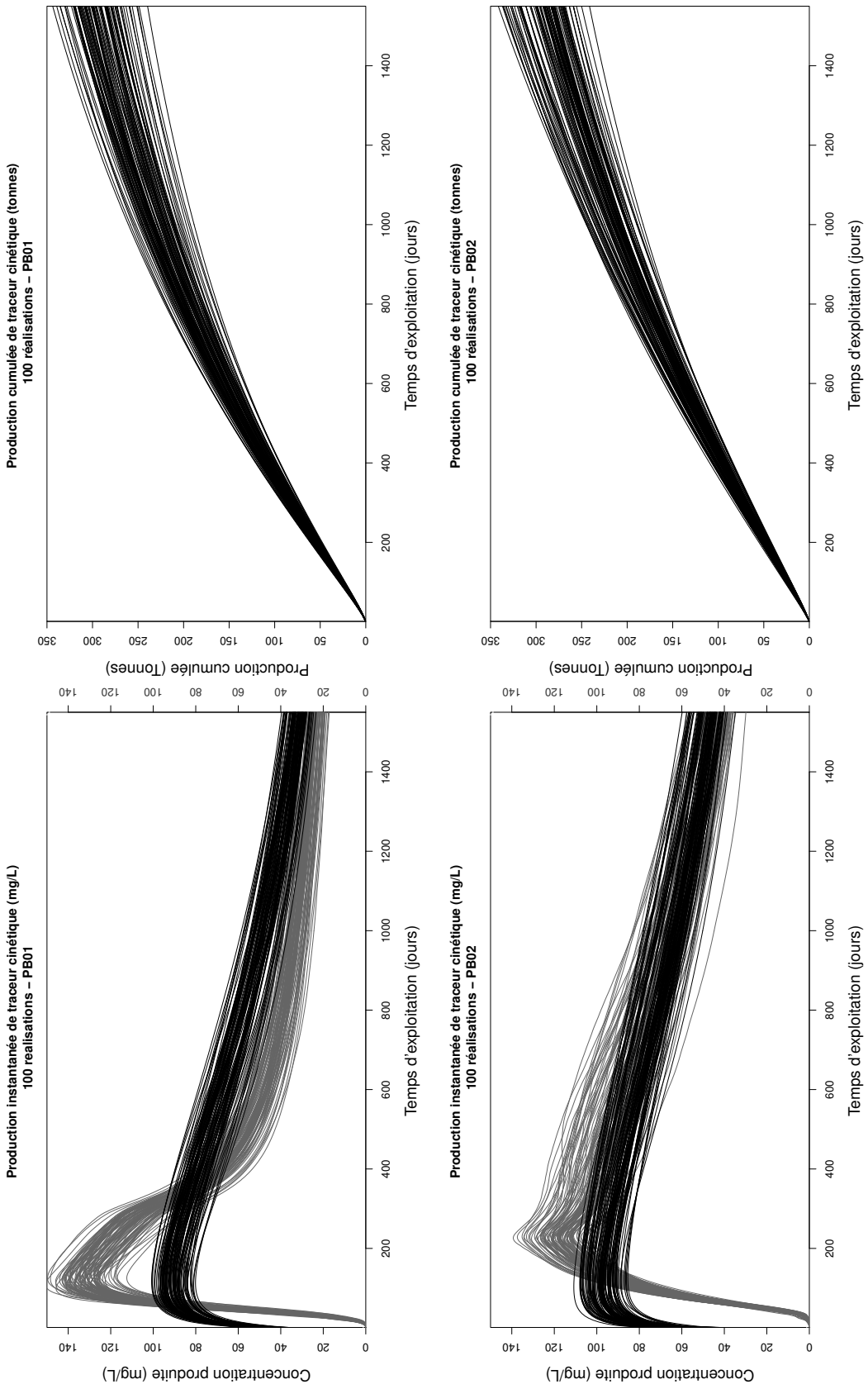

FIGURE 8.2 – *Graphiques des productions cumulées et instantanées du traceur cinétique des cent réalisations de PB01 et PB02. L'ajout d'une contrainte sur la cinétique de dissolution donne à ces courbes de production un aspect lisse plus représentatif de la production d'uranium. Les courbes grises représentent la production instantanée d'uranium des réalisations*

8.2.3 Comparaison des deux proxys

Comparaison du temps de calcul

Afin de départager les deux types de minéraux traceurs, on peut comparer deux critères : leur temps de simulation, et leur capacité à représenter la production d'uranium de la réalisation. Ainsi, on va pouvoir choisir le proxy le plus adapté à la description des réalisations dans la réduction de scénarios.

Les temps de calcul des simulations de récupération des traceurs hydro et cinétique ainsi que la production de l'uranium dans les blocs PB01 et PB02 sont indiqués dans le tableau 8.1.

Il faut noter que les comparaisons avec les temps de calcul des traceurs en solution sont particulièrement difficiles à faire en raison des différences de temps d'exploitation simulée, d'écritures de résultat entre les différents cas et d'une utilisation de machines de calcul ayant 24 CPU au lieu de 16.

Les valeurs de temps de simulation nous indique que le proxy cinétique est plus rapide que le traceur hydro. Le traceur dont la simulation est la plus rapide est le traceur le plus contraint. En effet, la contrainte cinétique limite les changements brusques de concentration en traceur dissous, et facilite donc la résolution de la dissolution et du transport du traceur. In fine, cela améliore le temps de calcul.

On remarque la présence de temps de calcul extrêmes de simulations de récupération de traceurs dans PB02. Il s'agit de simulations dont la convergence entre le transport et la résolution de la chimie est particulièrement difficile. Il s'agit des deux mêmes réalisations pour le traceur cinétique et le traceur hydrodynamique. Il s'agit probablement d'un problème de convergence dû à la discrétisation grossière du maillage (10mx10mx1m) et la répartition des voxels imperméables entraînant de très fort courant.

Ainsi, en regard du temps de calcul des traceurs, on cherchera à favoriser la lixiviation d'un traceur avec contrainte cinétique comme proxy. Celui-ci permet un gain d'un facteur de 3 à 7 par rapport aux simulations ISR-U de même temps d'exploitation.

	Min (h)	Median (h)	Mean (h)	Max (h)
Simulations traceurs hydro PB01	3	4.1	4.2	8.7
Simulations traceurs cinétique PB01	1.9	3	3.1	7.6
Simulation ISR-U PB01	20	22.5	23.3	39.1
Simulations traceurs hydro PB02	2.1	4	5.5	31.4
Simulations traceurs cinétique PB02	1.6	3.5	5.5	36.2
Simulations ISR-U PB02	10.5	13.6	13.8	31.9

TABLE 8.1 – *Temps de calcul nécessaire pour chaque simulation d'exploitation du traceur cinétique, hydro ou de l'uranium des blocs PB01 et PB02 pour cent réalisations en 1550 jours*

Comparaison des résultats des proxys

On rappelle les variables utilisées pour synthétiser la production d'uranium : la concentration au pic de production, la date d'arrivée du pic de production, la concentration en fin de simulation, et la production cumulée en fin de simulation. Ces mêmes variables peuvent être utilisées pour synthétiser la variabilité des courbes de production des minéraux traceurs. Le tableau 8.2 montre pour les blocs PB01 et PB02 la corrélation entre les descripteurs de la production d'uranium et les descripteurs de la production de traceurs.

On observe que ni le minéral traceur cinétique, ni le minéral traceur hydrodynamique n'arrivent à reproduire la dissimilarité des dates d'arrivée du pic de production d'uranium des réalisations. La corrélation cependant légèrement supérieure du traceur cinétique nous montrent que la date d'arrivée

PB01	Uranium - traceur hydro	Uranium - traceur cinétique
Date d'arrivée du pic de production	0.14	0.27
Amplitude du pic de production	0.80	0.88
Concentration en fin de simulation	0.96	0.96
Production cumulée en fin de simulation	0.96	0.96

TABLE 8.2 – *Corrélation entre les descripteurs des courbes de récupération des minéraux traceurs et des descripteurs de la production d'uranium. Le traceur cinétique se dégage comme produisant des descripteurs plus pertinents*

du pic est plus contrôlée par la cinétique des réactions que par les limitations de dissolution amenées par la constante d'équilibre de l'uranium.

Cependant, il y a une forte corrélation entre les valeurs des trois autres descripteurs sur la production d'uranium et sur la production de traceur. On remarque que le minéral traceur cinétique a une corrélation nettement supérieure pour l'amplitude du pic de production.

Pour conclure, en prenant en compte les temps de calcul des simulations traceurs et les résultats de corrélations de descripteurs, on choisira d'utiliser le minéral traceur cinétique pour décrire les réalisations dans une optique de réduction de scénarios.

En raison de la faible corrélation du descripteur sur la date d'arrivée du pic de production et de la très forte corrélation des trois autres, la combinaison finale de descripteurs utilisée comprend la concentration au pic de production du traceur minéral cinétique, la concentration en fin de simulation du traceur cinétique, et la production obtenue en fin de simulation du traceur cinétique. Ce choix est confirmé par les corrélations entre les distances proxys et les distances de références présentées dans le tableau 8.3.

Date d'arrivée du pic	Amplitude du pic	Concentration en fin de simulation	Production cumulée en fin de simulation	Corrélation des distances
				0.88
				0.90

TABLE 8.3 – *Évaluation de la qualité des combinaisons de descripteurs du traceur minéral cinétique à l'aide de la corrélation avec une distance de référence pour les cent réalisations de PB01*

8.3 Réduction de scénarios grâce au minéral traceur cinétique

8.3.1 Application sur PB01

Afin de faciliter la visualisation des résultats, on applique un MDS aux 3 dimensions. La variance cumulée portée par les composantes principales est montrée figure 8.3. On observe que deux composantes suffisent à expliquer la variabilité de l'ensemble.

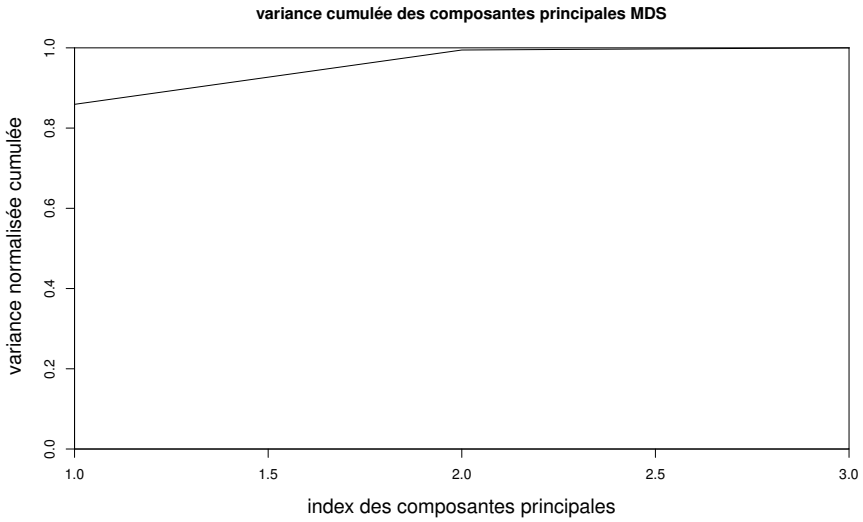

FIGURE 8.3 – *Variance cumulée associée aux composantes principales du MDS effectué sur les trois descripteurs retenus. Plus de 99% de la variance est expliquée par les deux premières composantes principales*

Dans le but de déterminer le nombre de clusters à construire lors du partitionnement, on calcule le coefficient de silhouette pour différents nombres de clusters. Le résultat est montré figure 8.4. Le meilleur compromis de silhouette entre le temps de calcul alloué et la qualité du partitionnement est visiblement 9 clusters.

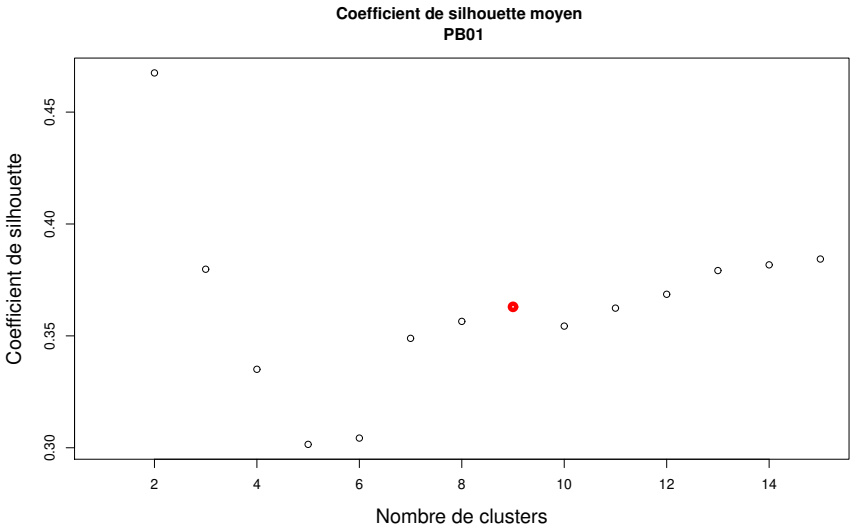

FIGURE 8.4 – *Silhouettes moyennes des réalisations en fonction du nombre de clusters après le partitionnement des réalisations de PB01 avec les descripteurs du minéral traceur cinétique. Le meilleur compromis est de 9 clusters*

Les neuf réalisations sélectionnées sont utilisées pour simuler l'exploitation par ISR de l'uranium. Enfin, les courbes de récupération en uranium sont utilisées avec leur pondération pour construire les courbes P_{10}, P_{50} et P_{90} approchées. Elles sont comparées à la quantification d'incertitude de la propagation directe. La comparaison est montrée figure 8.5. On y observe une excellente approximation. Les trois courbes approchées s'ajustent très bien aux courbes de références aussi bien pour les courbes de production cumulée qu'instantanée.

Afin de vérifier que la qualité de l'approximation provient bien de la bonne qualité des descripteurs, et afin de valider la robustesse de la combinaison, elle est utilisée pour PB02.

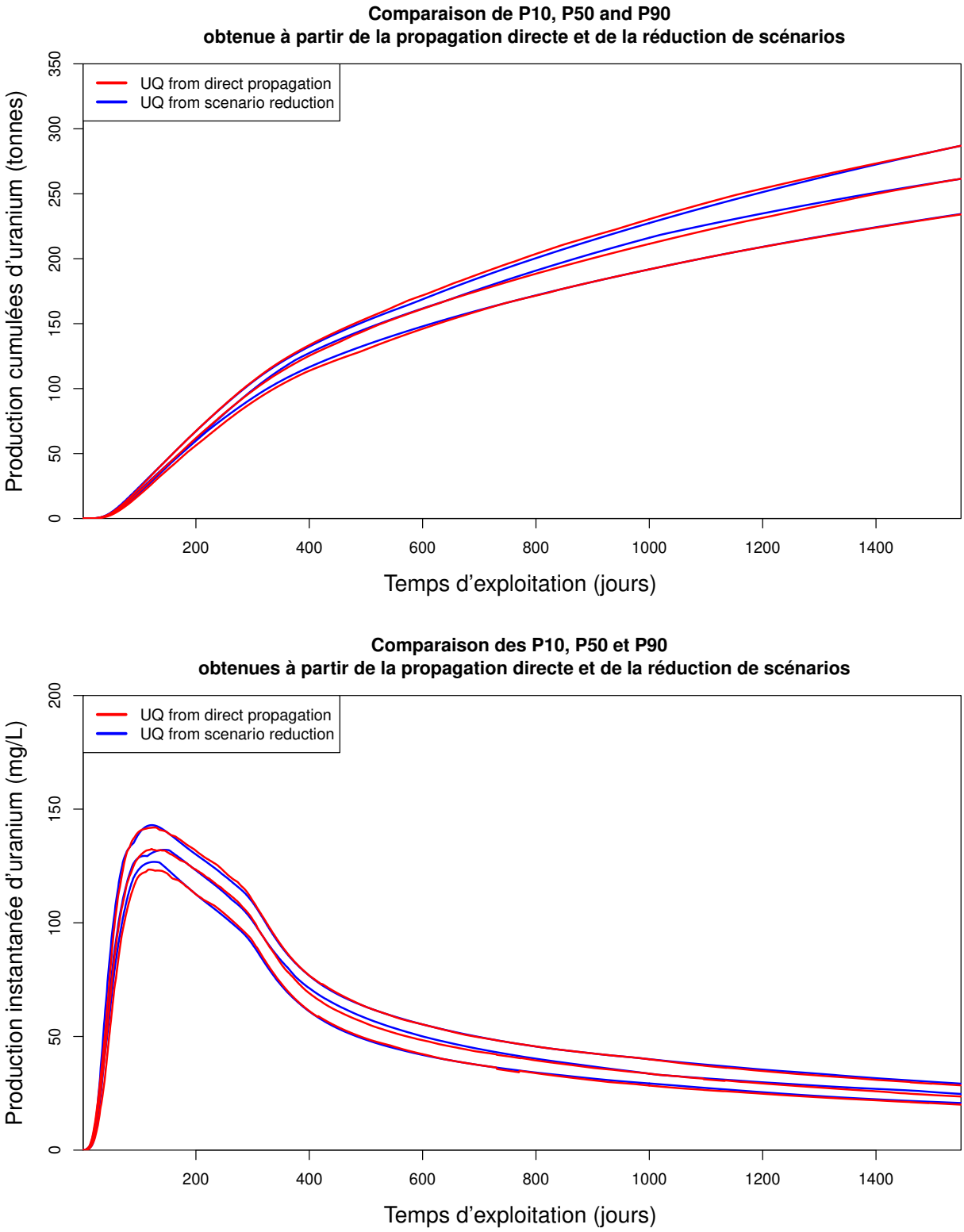

FIGURE 8.5 – *Comparaison de la quantification d'incertitude de référence et celle approchée par la réduction de scénarios utilisant les descripteurs de la récupération du minéral traceur cinétique sur PB01. Les courbes P_{10}, p_{50} et P_{90} de la production cumulée et de la production instantanée de référence sont très bien approchées par celles obtenues à partir de la réduction de scénarios*

8.3.2 Validation sur PB02

La combinaison de trois descripteurs de la récupération du minéral traceur cinétique dans PB02 est appliquée pour réduire le jeu initial de cent réalisations. La figure 8.6 présente la variance cumulée portée par les composantes principales après MDS. Les deux premières composantes expliquent plus de 99% de la variance des données.

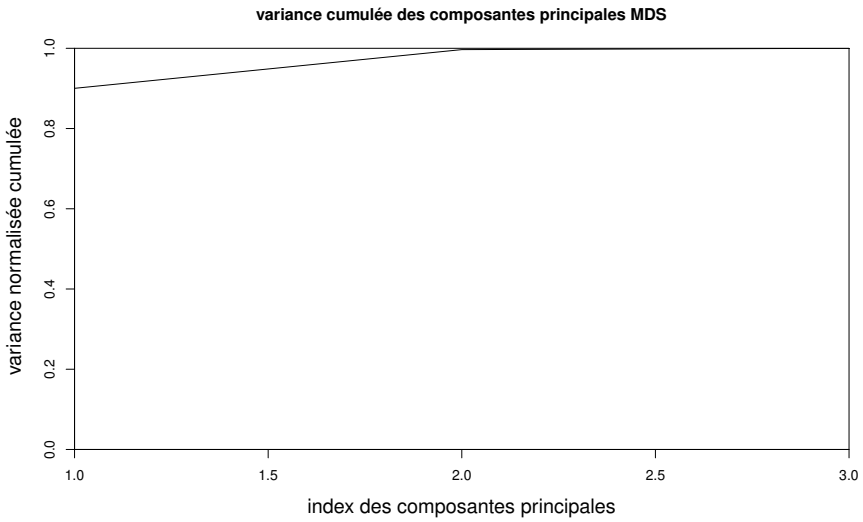

FIGURE 8.6 – *Variance cumulée portée par les composantes principales des descripteurs du minéral traceur cinétique sur PB02. Les deux premières composantes expliquent plus de 99% de la variance des données*

Les réalisations du bloc PB02 sont ensuite partitionnées. Le nombre de familles est choisi à l'aide du calcul du coefficient de silhouette avec différents nombres de clusters. On peut observer les résultats figure 8.7. Étant donné les résultats, on choisit de représenter l'ensemble des réalisations par 7 réalisations représentatives.

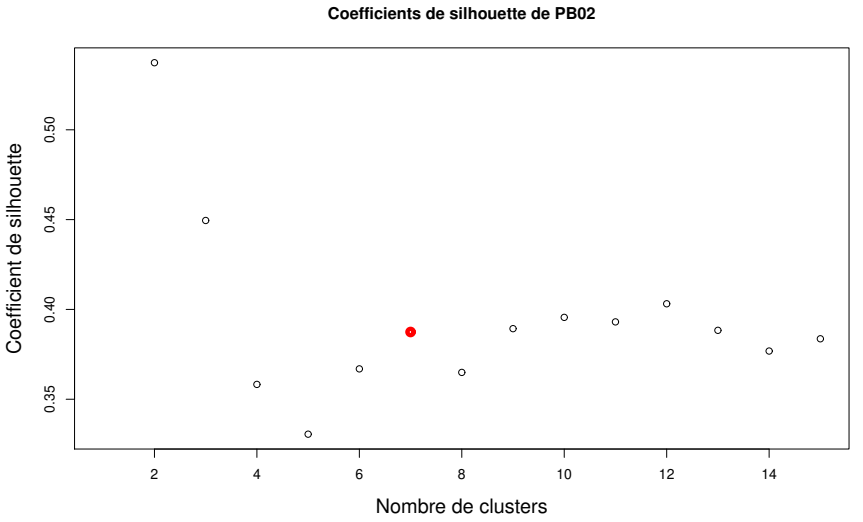

FIGURE 8.7 – *Silhouettes moyennes des réalisations en fonction du nombre de clusters après le partitionnement des réalisations de PB02 avec les descripteurs obtenues sur la récupération du minéral traceur cinétique. Dans ce cas ci, on choisira de sélectionner 7 réalisations représentatives*

Le médoïde de chaque famille est utilisé pour effectuer les simulations ISR-U. En utilisant la pondération de chaque médoïde et ses courbes de récupération d'uranium, on peut reconstituer

le premier décile, la médiane et le dernier décile de production. Ces courbes sont comparées avec les courbes de référence obtenues par propagation directe sur la figure 8.8. On observe encore une fois une bonne approximation des courbes de production cumulée par réduction de scénarios. Par rapport aux productions instantanées, on observe que le pic de production du P_{10} est légèrement trop faible, et le pic de production du P_{90} est légèrement trop élevé, mais les approximations restent raisonnable. Ainsi, la combinaison de descripteurs extraite des courbes de récupération du traceur cinétique permet de bien d'échantillonner l'ensemble des réalisations par réduction de scénarios. Les résultats sur PB01 et PB02 valident donc l'utilisation de la récupération d'un minéral traceur contrôlé cinétiquement comme proxy de la récupération d'uranium.

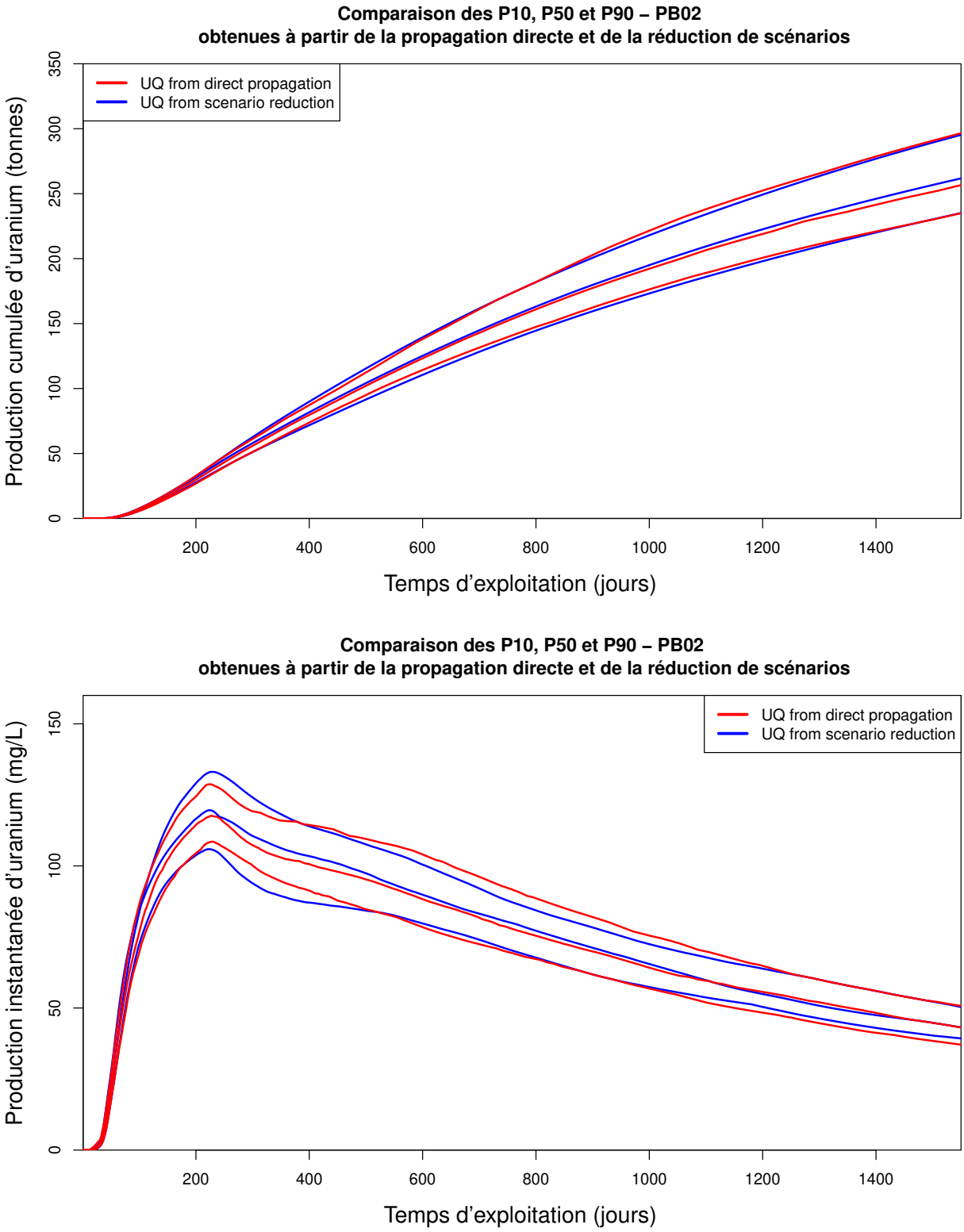

FIGURE 8.8 – *Comparaison de la quantification d'incertitude de référence et celle approchée par la réduction de scénarios utilisant les descripteurs obtenues sur la récupération du minéral traceur cinétique sur PB02. On observe une très bonne approximation entre les P_{10}, p_{50} et P_{90} de référence et les déciles approchés par réduction de scénarios. On remarque tout de même une très légère sur-estimation de l'enveloppe d'incertitude au niveau du pic de production*

8.4 Réduction du temps de simulation du proxy

La simulation de la lixiviation du minéral traceur présente un coût en temps de calcul non négligeable. Il est donc intéressant de savoir s'il est nécessaire de simuler le proxy aussi longtemps que la simulation ISR-U. Afin d'y répondre, on calcule la corrélation entre les distances de référence des blocs (à 1550 jours) avec les distances calculées à partir des descripteurs retenus, mais en faisant varier la date pour les descripteurs "Concentration de traceur produite en fin de simulation" et "Production cumulée de traceur en fin de simulation". On obtient donc pour chaque bloc le graphique de la variation de la valeur de la corrélation en fonction de la date de fin de simulation pour le traceur. On peut observer ces graphiques figure 8.9.

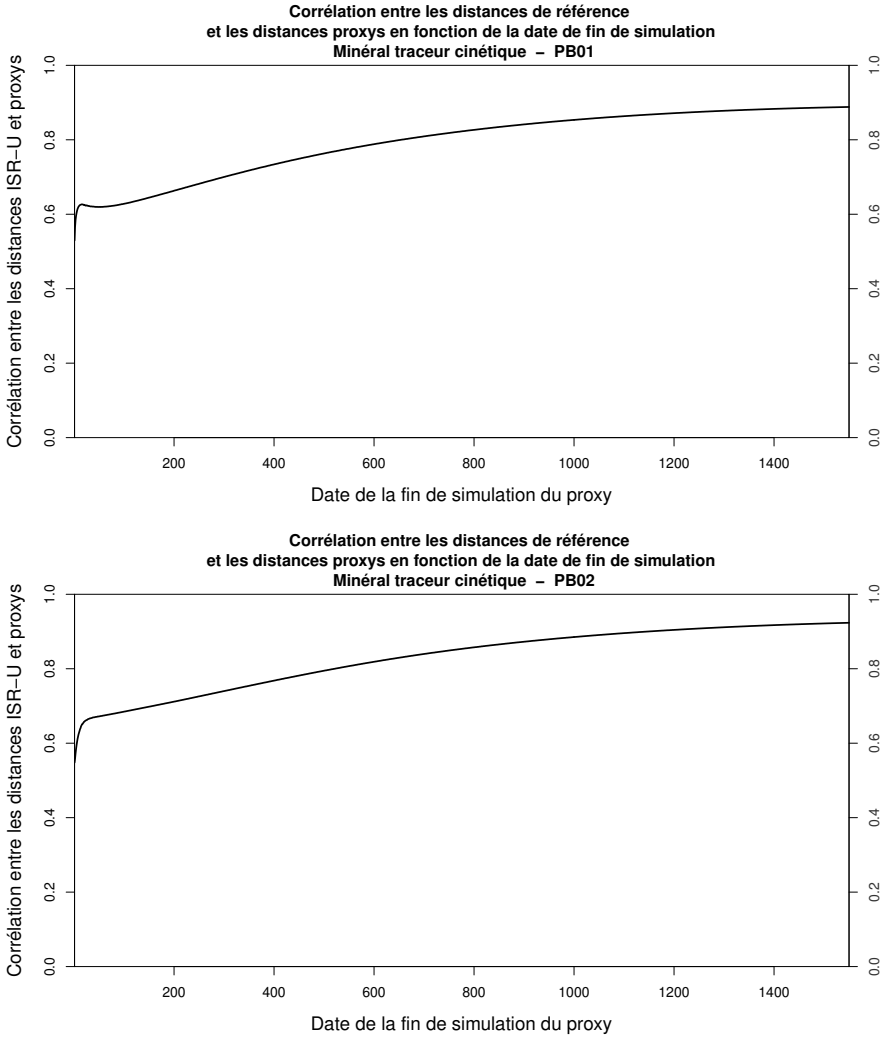

FIGURE 8.9 – *Corrélation entre les distances de référence et les distances proxys en fonction de la date de fin de simulation des traceurs. On observe dans les deux cas que la corrélation ne s'améliore plus que très lentement à partir des 900 jours*

Les résultats montrent que dès les premiers mois on obtient une corrélation relativement élevée entre les deux jeux de distances. Au bout de 900 jours, la corrélation atteint un plateau et ne s'améliore plus que faiblement avec l'augmentation du temps de simulation. On conclut donc qu'il n'est pas nécessaire de simuler la lixiviation du minéral traceur cinétique aussi longtemps que l'ISR-U pour avoir une bonne reproduction de la dissimilarité entre les réalisations. Il est délicat de donner une date précise, mais il me semble raisonnable de simuler la récupération du traceur sur les deux tiers du temps de la simulation ISR-U. Cette réduction possible du temps de simulation provient de l'absence de phase d'acidification dans le proxy, et de l'absence de contraintes liées à l'apport de réactifs jusqu'à l'uraninite, accélérant ainsi la récupération du minerai.

8.5 Conclusions

Les minéraux traceurs hydrodynamique et cinétique sont développés pour que leur exploitation puisse être utilisée comme proxy de l'exploitation d'uranium. Les gains en temps de calcul de ces deux proxys sont suffisants pour une utilisation dans la réduction de scénarios.

On observe que les différences de production de chacun des traceurs entre les réalisations reproduisent bien la dissimilarité portée par l'amplitude du pic de production d'uranium, de la production cumulée d'uranium en fin de simulation et de la concentration d'uranium produite en fin de simulation. En revanche, aucun des deux proxys n'arrive à recréer la dissimilarité des réalisations concernant la date d'arrivée du pic de production d'uranium.

Le proxy utilisant un minéral ayant une dissolution contrôlée cinétiquement arrive à des résultats légèrement meilleurs et en moins de temps de calcul. Les résultats de réduction de scénarios sur PB01 et PB02 utilisant le proxy de lixiviation de minéral traceur cinétique montrent une très bonne approximation de la quantification d'incertitude par les quelques réalisations sélectionnées. On valide donc l'utilisation de ce proxy pour approximer les dissimilarités des réalisations.

Les simulations proxys ont un temps de calcul non négligeable. Cependant, il n'est pas forcément nécessaire de simuler une exploitation du traceur aussi longtemps que la simulation ISR-U. En effet on observe que les productions de traceurs à plus court terme arrivent à reproduire la dissimilarité de la production d'uranium à plus long terme.

Les quelques valeurs extrêmes de temps de calcul des simulations proxys de PB02 sont probablement conjointement dues à des dispositions particulières de lentilles imperméables et à la taille de la maille de discrétisation. On conseillera donc de favoriser l'échelle de discrétisation 5mx5mx1m par rapport à 10mx10mx1m pour simuler les réalisations géostatistiques afin de limiter les problèmes de résolution numérique coûteux en temps. De plus, le fait d'avoir mis en place la réduction de scénario permet de calculer des simulations ISR-U plus coûteuse en temps.

Finalement, j'aimerais souligner que le proxy ne représente ni les effets d'apport et de consommation des réactifs, ni la phase d'acidification de l'exploitation. De plus, il n'est pas capable d'approcher la part de dissimilarité portée par la date d'arrivée du pic de production. Il serait intéressant d'étudier la construction d'un proxy tenant compte de ces phénomènes pour obtenir une bonne approximation de la variabilité de la date d'arrivée du pic.

Synthèse de la réduction de scénarios en ISR-U

Dans cette partie, nous avons adapté la méthode de réduction de scénarios introduite par Scheidt and Caers [2009] à notre problème. On rappelle qu'elle se compose des étapes suivantes :

- *Description des réalisations* : Un ou plusieurs proxys de la récupération de l'uranium sont appliqués à chaque réalisation. Une description sous la forme d'un vecteur est extraite de leurs résultats.
- *Normalisation des descripteurs* : Chaque descripteur des réalisations est centré et réduit. Cela permet de donner le même poids à chaque descripteur dans la réduction de scénarios. La gestion de poids différents augmenterait fortement la complexité de la paramétrisation de la réduction de scénarios.
- *Calcul de la matrice de distance* : Les descripteurs des réalisations peuvent être considérés comme les coordonnées des réalisations dans l'espace des descripteurs. On calcule la dissimilarité entre chaque paire de réalisations comme la distance euclidienne entre celles-ci dans l'espace des descripteurs.
- *Multi-Dimensional Scaling* : L'application du MDS sur la matrice de dissimilarité permet de réduire les dimensions de l'espace des descripteurs en minimisant la perte d'information. Cela facilite la visualisation des résultats.
- *Choix du nombre de réalisations représentatives* : Un des paramètres de la réduction de scénarios est le nombre de familles partitionnées par l'algorithme des k-médoïdes, et donc le nombre de réalisations représentatives à sélectionner. Pour choisir ce paramètre, on calcule le coefficient de silhouette des partitionnements en fonction du nombre de réalisations représentatives. On le choisit en choisissant la silhouette maximale dans le nombre de réalisations représentatives autorisées.
- *Simulations ISR-U* : La simulation de l'exploitation par ISR grâce au transport réactif est ensuite simulée dans chacune des réalisations sélectionnées.
- *Quantification d'incertitude* Grâce à la pondération donnée par la proportion de réalisations contenues dans la famille de chaque réalisation représentative, la quantification d'incertitude peut être calculée. Elle est calculée comme la sélection des productions P_{10}, p_{50} et P_{90}.

Contrairement à ce qui a été proposé par [Scheidt and Caers, 2009], l'utilisation de noyau pour sélectionner les réalisations représentatives n'a pas été retenue. En effet, on n'observe pas de structures particulières dans les nuages de points représentant les réalisations dans l'espace des descripteurs à linéariser. Quelques essais ne montrent pas d'amélioration des résultats.

Entre toutes les réductions de scénarios effectuées, on observe que le nombre optimal de réalisations représentatives avoisine huit. C'est pourquoi on choisira huit réalisations représentatives pour les réductions de scénarios du chapitre 9.

Dans le but de décrire rapidement et efficacement les réalisations, différents proxys ont été étudiés dans cette thèse. En premier lieu, dans le chapitre 6, les proxys statiques possèdent l'avantage d'être quasiment instantanés à calculer, et donc d'être facilement déployable. Si les résultats de leur utilisation montrent qu'ils ne parviennent que difficilement à reproduire les courbes, ils permettent cependant d'obtenir un ordre de grandeur de l'enveloppe d'incertitude des réalisations. Afin d'améliorer la description des réalisations, le couplage des proxys statiques avec différents proxys basés sur

la récupération de traceurs en solution à l'instant initial est étudié dans le chapitre 7. Ces nouveaux proxys sont plus longs à calculer puisqu'ils nécessitent de faire intervenir un simulateur d'écoulement dans le réservoir. Les résultats montrent tout d'abord que les traceurs des faciès géochimiques oxydé, réduit, basse teneur et le traceur injecté n'améliorent pas la description des réalisations. L'utilisation du traceur des hautes teneurs montre une légère amélioration des résultats. L'amélioration n'est cependant pas suffisante en regard de l'augmentation du temps de calcul pour que ce proxy soit utile en opération. Le dernier type de proxy est basé sur la lixiviation d'un minéral traceur artificiel. Les résultats du chapitre 8 montrent que la lixiviation d'un minéral traceur dont la dissolution est contrôlée cinétiquement obtient les meilleurs résultats de quantification d'incertitude par réduction de scénarios. Il n'a pas besoin d'être combiné avec les proxys statiques. L'utilisation du proxy cinétique permet d'approximer efficacement la quantification d'incertitude de référence. Cependant la simulation de la lixiviation du traceur rend la phase de description plus longue.

Différentes solutions peuvent être envisagées pour réduire le temps de simulation des traceurs. Tout d'abord la diminution de la durée de l'exploitation du traceur permettrait un gain de temps important. De plus, l'impact de la différence de densité entre le fluide injecté et l'aquifère en place sur le calcul de l'écoulement est pris en compte dans la simulation. Il serait intéressant de quantifier l'impact de la suppression de l'écoulement densitaire sur la capacité des proxys à approximer la récupération en uranium, et sur le gain de temps de calcul provenant de la simplification de la résolution de l'écoulement.

Le gain de temps de la réduction de scénarios dépend du proxy utilisé dans la phase de description. S'il s'agit de proxys statiques, la réduction du temps de simulation est extrêmement grande. Elle est approximativement égale à :

$$1 - \frac{\sum \textit{Temps des k simulations ISR-U}}{\sum \textit{Temps des N simulations ISR-U}} \tag{8.6}$$

S'il s'agit du proxy du minéral traceur cinétique, la réduction de temps de calcul est plus faible, mais le résultat est plus précis. Elle est approximativement égale à :

$$1 - \frac{\sum \textit{Temps des N simulations traceurs} + \sum \textit{Temps des k simulations ISR-U}}{\sum \textit{Temps des N simulations ISR-U}} \tag{8.7}$$

Les simulations ISR-U de PB01 durent en moyenne 23 heures, et celles de PB02 14 heures. Les simulations traceurs de même durées durent en moyenne 3 heures pour PB01 et 5 heures pour PB02.

La réduction de scénarios est testée, dans les cas d'applications présentés, sur des réalisations contraintes aux puits d'exploration et de développement. Cependant, la modification du conditionnement des réalisations, par exemple avec une mise à jour aux puits technologiques ne remet pas en question les principes sur lesquels se fondent les proxys statiques et cinétiques. La qualité du proxy cinétique provient du fait qu'il reproduit les écoulements de fluide au cours de l'exploitation. On peut donc supposer que celui-ci permet toujours de reproduire assez fidèlement la dissimilarité de production d'uranium entre les réalisations conditionnées aux trois phases de forages.

Chapitre 9

Impact de l'incertitude de production sur le calcul du plan minier

9.1 Planification minière long terme de l'exploitation

Les règles et les consignes de gestion de l'exploitation à l'échelle de l'ensemble de la mine sur la prochaine décennie sont définies dans le plan minier. Il planifie l'ensemble des actions des opérateurs de la mine, telles que les quantités de réactif à injecter, ou les dates d'ouverture et de fermeture des blocs de production. Le plan minier définit un scénario d'exploitation de l'ensemble de la mine en respectant les contraintes hydrauliques du réseau de transport des fluides et des usines, et permet de s'assurer de l'atteinte de l'objectif annuel de production d'uranium. L'objectif de production annuelle est imposé par l'état kazakhstanais en même temps que la concession de l'exploitation. Le plan minier permet de plus d'évaluer la faisabilité du projet, d'évaluer un plan d'actions de développement et de calculer un budget d'investissement sur l'exploitation.

Un des paramètres d'entrée du calcul du plan minier est la prévision de production des blocs de production de la mine. Or la production des blocs utilisée dans le modèle actuel de calcul du plan minier est modélisée par une unique courbe déterministe. Il n'y a pas de prise en compte de l'incertitude sur la production des blocs. L'objectif de ce chapitre est de montrer l'impact de cette incertitude sur deux sorties du plan minier. On s'intéresse donc aux variations de la quantité d'uranium produite par jour (en tonnes) à l'échelle de la mine, et aux dates d'ouverture et de fermeture des différents blocs de production, en fonction de l'incertitude de la production en entrée. La séquence d'ouverture et de fermeture des blocs est appelée séquence minière. L'objectif de ce chapitre est de quantifier l'incertitude dans quelques blocs de production par réduction de scénarios, et de la propager dans le calcul du plan minier.

On appellera "GSM", le modèle de calcul de plan minier actuellement en développement dans le département R&D d'Orano Mining. Le modèle est implémenté dans le logiciel de modélisation de systèmes dynamiques GoldSim [GoldSim, 2021]. Ce modèle numérique automatise une tâche qui prendrait manuellement plusieurs semaines.

Cette vitesse d'exécution du modèle permet de prendre rapidement en compte de nouveaux paramètres d'exploitation, de nouvelles contraintes de production, ou encore de tester différents scénarios d'exploitation. Une autre conséquence de la rapidité de calcul est la possibilité de tester la sensibilité des résultats à la variabilité des paramètres d'entrée qui est particulièrement importante dans le cadre de l'évaluation des risques de production.

Cependant, si GSM présente un stade de développement avancé et permet d'élaborer un plan minier réel à l'échelle de toute la mine, celui-ci ne peut, pour l'instant, être utilisé pour une analyse de sensibilité sur la production d'uranium des blocs. En effet, il n'y a pas encore de module d'analyse de sensibilité automatisé en fonctionnement, et il n'est pas possible de mettre en place la réduction de scénarios pour un nombre de blocs suffisamment grand dans le temps imparti pour la thèse. Ainsi, un modèle de calcul de planification simplifié a donc été construit en partenariat avec un prestataire dans le logiciel GoldSim. Il se nomme "GSM_UQ". GSM_UQ gère quatre blocs de production,

travaille à ordre d'ouverture imposé et utilise un modèle de calcul de planification basé sur l'atteinte de l'objectif de production, sans considération des contraintes hydrauliques. L'utilisation de GoldSim pour les GSM et GSM_UQ permet de faciliter la diffusion de leurs résultats au sein de Katco et d'Orano Mining.

En raison des limitations du modèle simplifié et des hypothèses utilisées lors des simulations ISR-U des blocs, les résultats obtenus ont simplement comme objectif de souligner l'intérêt d'étudier la sensibilité d'un plan minier aux incertitudes sur la production d'uranium des blocs.

Le modèle simplifié utilisé pour propager l'incertitude de production dans le calcul du plan minier est décrit dans la première section du chapitre. La deuxième section présente les quatre blocs de production utilisés et les résultats des réductions de scénarios pour chacun. Enfin, la dernière section présente deux études de propagation d'incertitude. La première étude utilise les productions P_{10}, P_{50} et P_{90} des blocs pour quantifier la variabilité de la production de la mine et de la séquence minière en respectant l'objectif de production. Le deuxième cas étudie la robustesse d'une séquence minière donnée à respecter l'objectif de production en ayant des productions de bloc pessimistes ou optimistes.

9.2 Modèle simplifié de propagation de l'incertitude de production

9.2.1 Objectif minier

Le paramètre primordial de cette chaîne de décision est la production annuelle cible. Elle varie peu d'année en année. Dans la pratique, les objectifs de production doivent être réalisés aussi exactement que possible, en limitant les excédents ou déficits. Dans GSM_UQ, la contrainte de production est simplifiée et consiste à réaliser un minimum de production. La simplification de la contrainte d'objectif de production est nécessaire en raison de la diminution du nombre de blocs simultanément en exploitation. Quatre blocs ne donnent pas suffisamment de liberté pour ajuster exactement la production de la mine à l'objectif annuel.

Afin de vérifier que la production à un instant t est suffisante pour atteindre l'objectif annuel, on compare celle-ci avec la consigne actualisée. La consigne actualisée est une production cible journalière calculée en fonction de l'uranium déjà produit dans l'année et du temps restant pour atteindre l'objectif annuel.

Elle correspond à la formule $Consigne_journaliere = \frac{Objectif_annuel - Production_cumulee_annuelle}{Jours_restants}$. L'utilisation de cette consigne permet d'adapter la production et l'ouverture des blocs pour ajuster la production à l'objectif annuel.

La date de fermeture d'un bloc, quant à elle, dépend d'un paramètre choisi par l'utilisateur. Il s'agit de la teneur de coupure. C'est la concentration en uranium dissous des fluides produits en dessous de laquelle on juge qu'un bloc n'est plus intéressant économiquement. Si la concentration produite n'atteint pas le seuil de coupure, le bloc s'arrête à la fin de la courbe de production fournie par l'utilisateur.

9.2.2 Paramètres temporels de contrôle du calcul du plan minier

Afin de contrôler le calcul des dates d'ouverture de la séquence minière, différents paramètres sont utilisés. Tout d'abord, un temps minimal d'attente entre l'ouverture de deux blocs est paramétrable. Il permet de prendre en compte le temps nécessaire à la mise en fonction opérationnelle d'un bloc et la gestion du temps d'acidification d'un bloc.

Le deuxième paramètre de contrôle temporel est la possibilité d'imposer des dates d'ouverture pour chaque bloc. Ainsi, ce paramètre permet de tester la robustesse d'une séquence minière calculée sur un certain jeu de paramètre face à une production incertaine d'uranium.

L'ordre d'ouverture des blocs est imposé par l'utilisateur.

9.2.3 Input de production d'uranium des blocs possibles

La production d'uranium de chaque bloc est une entrée du modèle. Une fois les réductions de scénarios effectuées, chaque bloc possède, d'une part trois courbes de production correspondant aux P_{10}, P_{50} et P_{90}, et d'autre part les courbes de production pondérées obtenues par la réduction de scénarios. Huit réalisations représentatives sont sélectionnées pour chacun des blocs. Il s'agit du nombre moyen de réalisations nécessaires pour une bonne approximation de la quantification d'incertitude par réduction de scénarios en ISR comme observé dans les chapitres 6, 7 et 8.

Dans un premier temps, la répercussion de l'incertitude de production des blocs dans le plan minier est faite avec les courbes P_{10}, P_{50} et P_{90} de chaque bloc.

9.2.4 Résumé du modèle GSM_UQ

Le tableau 9.1 liste les paramètres utilisables pour contrôler le calcul du plan minier.

Objectif de production annuelle	tonnes
Teneur de coupure	mg/L
Temps minimal d'attente	Jours
Dates d'ouverture imposées pour chaque bloc	Jours
Ordre d'ouverture des blocs	Index des blocs
Courbe de production à utiliser	Index des courbes

TABLE 9.1 – *Paramètres d'entrée du modèle GSM_UQ*

La chaîne de décision journalière permettant de décider l'ouverture d'un nouveau bloc est décrite par les instructions suivantes :

- *Initialisation* : Ouverture du premier bloc
- *Chaque jour, tant que l'on exploite la mine* :
  - On calcule la nouvelle consigne de production journalière ;
  - On calcule la production du jour des blocs ouverts ;
  - On ferme les blocs dont la production est inférieure au seuil fixé ;
  - Si la production du jour est inférieure à la consigne :
    - Si le temps depuis la dernière ouverture est supérieur au temps d'attente :
      - Ouvrir le bloc suivant ;
    - Sinon : passer au jour suivant ;
  - Sinon : passer au jour suivant ;

9.3 Données de production d'uranium

9.3.1 Choix des blocs

Le modèle GSM_UQ permet de travailler avec la production d'uranium de quatre blocs. Les blocs choisis font partie de la même zone minière. Dans cette zone se trouve le bloc PB01 étudié dans les chapitres 5 à 8. Il s'agit d'un argument important puisque les différentes simulations ISR-U et les simulations proxys de dissolution de traceurs faites dans ce bloc ont montré une grande stabilité numérique. Aucun problème particulier de convergence n'est venu fortement ralentir les calculs, comme montré au chapitre 8. Les blocs sont nommés PB_A, PB_B (PB01), PB_C et PB_D. La répartition géographique des blocs est montrée sur la figure 9.1.

9.3.2 Quantification des incertitudes de production des blocs par réduction de scénarios

Les simulations géostatistiques des propriétés des réalisations sont calculées sur un domaine englobant les quatre blocs. Pour chaque bloc, cent réalisations sont extraites. Ensuite, le proxy du minéral traceur cinétique, tel que décrit dans le chapitre 8, est utilisé pour chaque réalisation.

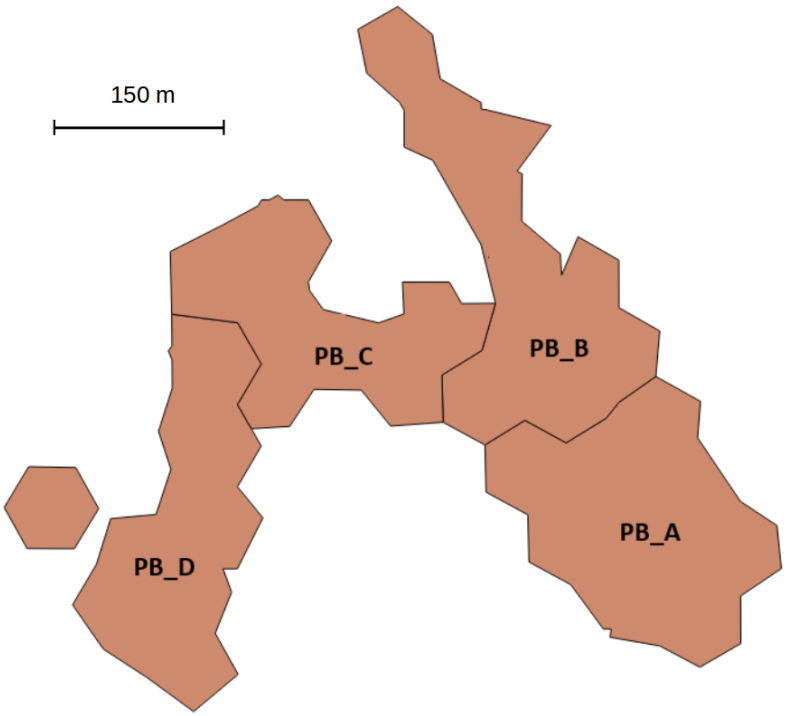

FIGURE 9.1 – *Carte des quatre blocs utilisés dans la propagation de l'incertitude de production dans le plan minier*

Les descripteurs extraits des résultats du proxy sont ensuite utilisés pour effectuer une réduction de scénarios pour chaque bloc. Les simulations ISR-U effectuées dans les réalisations sélectionnées permettent enfin de quantifier l'incertitude de production de chaque bloc. Afin de travailler sur des simulations de transport réactif de taille raisonnable, les simulations proxys, les réductions de scénarios puis les simulations ISR-U sont effectuées indépendamment pour chaque bloc. Les transferts de réactifs et d'uranium dissous entre les blocs au cours de l'exploitation ne sont pas pris en compte. La gestion des dépendances inter-blocs au cours des simulations proxys et ISR-U et au cours de la réduction de scénarios dans des blocs adjacents est encore non-résolue et reste un problème ouvert.

Pour chaque bloc, 8 réalisations sont sélectionnées pour approximer la variabilité de récupération d'uranium. Grâce à ces données, et comme décrit dans la partie 4.2.4, les courbes P_{10}, P_{50} et P_{90} sont construites. Ces courbes pour chaque bloc sont présentées dans la figure 9.2. On y observe que chaque bloc possède sa variabilité propre et des gammes de valeurs de production particulières.

9.3.3 Utilisation des courbes

Les cas d'applications présentés utilisent les courbes de quantification d'incertitude P_{10}, P_{50} et P_{90} comme paramètres d'entrée du modèle GSM_UQ. Dans le premier cas d'application, leur utilisation va permettre de tester la sensibilité du calcul d'une séquence minière avec des blocs en sous-production ou sur-production relativement à la production médiane. Dans le deuxième cas d'application, ces courbes seront utilisées pour tester la robustesse d'une séquence minière donnée à une forte erreur de prévision de production (positive ou négative) en regard de l'objectif de production.

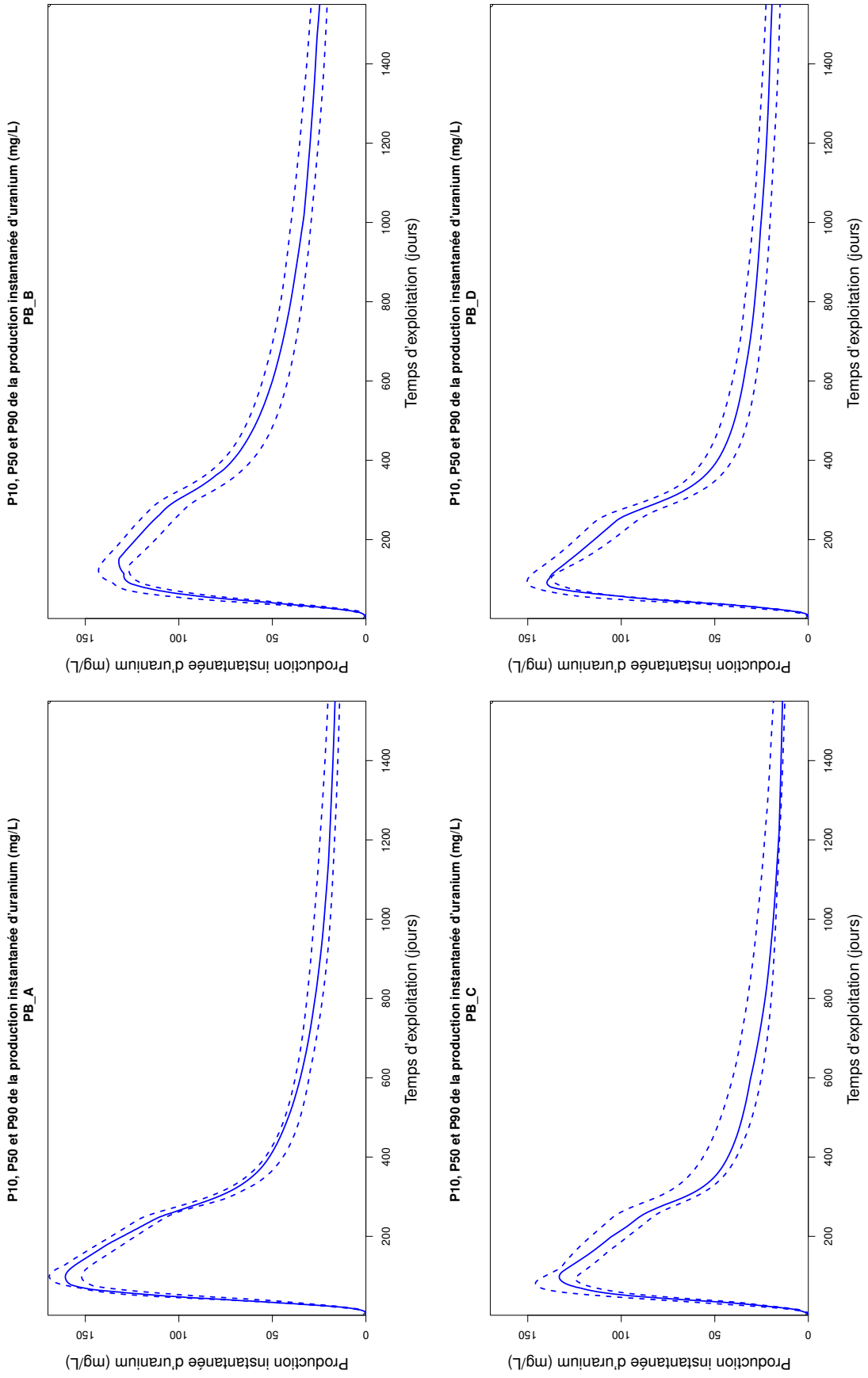

FIGURE 9.2 – P_{10}, P_{50} *et* P_{90} *approximées des blocs utilisés pour la propagation d'incertitude dans le calcul de la séquence minière*

9.4 Applications

9.4.1 Calcul du plan minier à dates d'ouverture et de fermeture libres

L'objectif global des cas d'application présentés ci-après est de qualifier l'impact de l'incertitude de production sur la séquence minière. Les hypothèses simplificatrices du modèle GSM_UQ ne permettent pas de donner des valeurs utilisables directement par les opérateurs. Cependant, ces résultats montrent l'importance de prendre en compte l'incertitude dans le calcul de planification.

Une séquence de production unique peut être fournie en entrée du modèle pour estimer son impact sur l'exploitation. Cependant la séquence fournie est très souvent construite à partir de production déterministe pour chaque bloc. Dans notre cas, on considère trois cas de production par bloc. Un premier cas de référence où chaque bloc produit selon la courbe P_{50}. Un cas pessimiste où chaque bloc produit selon sa courbe P_{10}. Et enfin un cas optimiste où chaque bloc produit selon sa courbe P_{90}. Dans chacun des cas, GSM_UQ va calculer les dates d'ouverture et de fermeture selon les paramètres du tableau 9.2. L'objectif annuel est fixé à 130 tonnes d'uranium par an. Cela correspond environ au cumul d'uranium produit par les quatre blocs divisé par les huit années d'exploitation de la zone.

Objectif de production annuelle	130 tonnes
Teneur de coupure	20 mg/L
Temps minimal d'attente	90 Jours
Dates d'ouverture imposées pour chaque bloc	Aucune
Ordre d'ouverture des blocs	PB_A ⇒ PB_B ⇒ PB_C ⇒ PB_D
Courbe de production à utiliser	P_x

TABLE 9.2 – *Paramètres d'entrée des calculs de plans miniers à dates libres*

Les trois calculs de plans miniers avec GSM_UQ permettent d'obtenir trois types de résultats : la date d'ouverture de chaque bloc (tableau 9.3), et la production journalière de la zone minière (graphique 9.3) dont on peut déduire l'atteinte de l'objectif annuel (tableau 9.4).

Bloc ouvert	Deuxième bloc	Troisième bloc	Quatrième bloc
Séquence minière pessimiste	290 jours	721 jours	1081 jours
Séquence minière de référence	361 jours	736 jours	1147 jours
Séquence minière optimiste	361 jours	802 jours	1441 jours

TABLE 9.3 – *Séquence minière des blocs dans différents calculs de plan minier à dates libres*

Année d'exploitation	An 1	An 2	An 3	An 4	An 5	An 6	An 7	An 8
Production pessimiste (tonnes)	134.6	166.5	183	186.4	85.1	30.7	9.1	0
Production de référence (tonnes)	136	176.4	209.5	214.6	118.3	45.2	28.6	12.5
Production optimiste (tonnes)	143	187.5	221.1	152.3	224.4	99.3	53.6	37.7

TABLE 9.4 – *Résultats de production annuelle des différents calculs de plan minier à dates libres en tonnes d'uranium. Le modèle considérant les P_{90} de production des blocs atteint l'objectif de production une année de plus que les autres cas. Les résultats de productions rouges sont ceux qui n'atteignent pas l'objectif annuel de 130 tonnes*

D'après les dates d'ouverture des blocs présentées dans le tableau 9.3, plus les blocs ont une production faible, plus ceux-ci seront ouverts rapidement. Ceci permet de respecter la consigne de production annuelle. Cette différence de séquence minière peut être très importante. On le remarque particulièrement pour le dernier bloc qui a une différence de date d'ouverture d'un an entre le cas pessimiste et le cas optimiste.

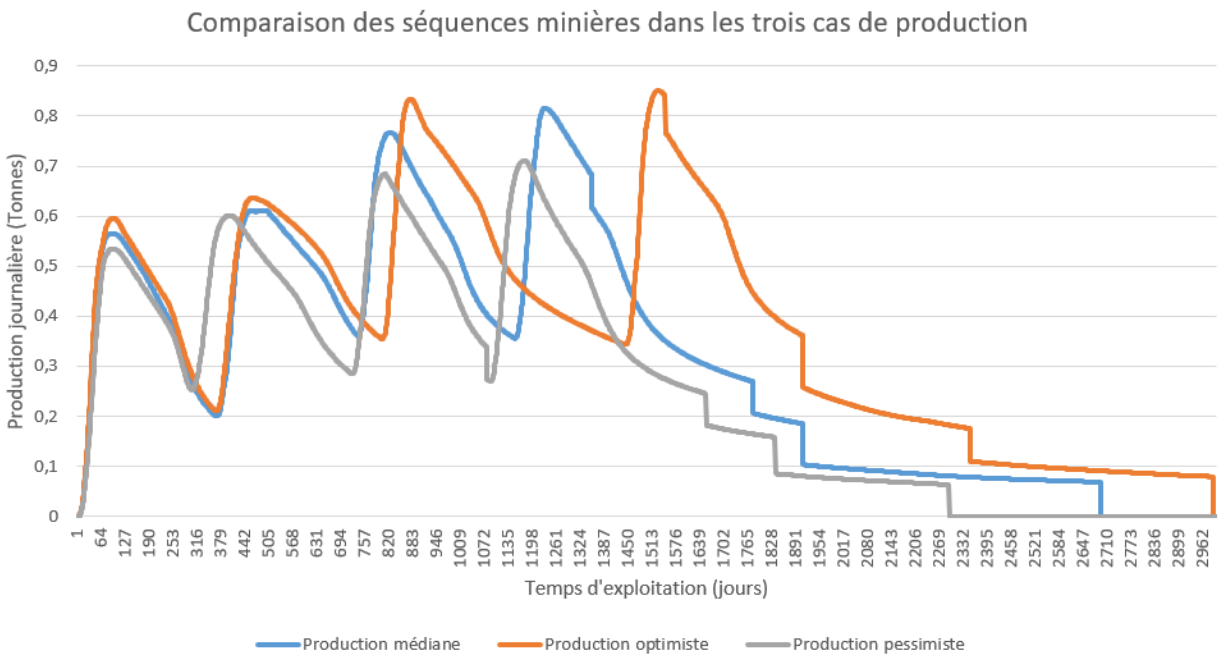

FIGURE 9.3 – *Courbes de production journalière de l'exploitation des plans miniers calculés avec dates libres*

Les trois calculs de plan minier respectent l'objectif annuel tant qu'au moins un bloc est dans sa phase de pic de production. Le cas optimiste utilisant les P_{90} respecte la consigne une année de plus que les autres cas, et produit plus longtemps.

9.4.2 Calcul du plan minier à dates d'ouverture et de fermeture fixées

Vis-à-vis de l'exploitation, la production réelle des blocs sera différente de celle utilisée pour calculer la séquence minière. On peut donc se poser la question de la robustesse de la séquence minière de référence à une sur-production ou à une sous-production pour respecter les objectifs.

GSM_UQ peut être utilisé pour modéliser la production globale de la zone avec une séquence minière imposée. On va donc observer la répercussion de productions pessimistes ou optimistes dans un plan minier à partir d'une séquence minière fixée. Les paramètres de simulation sont présentés dans le tableau 9.5. L'objectif annuel de production est de 130 tonnes par an.

Objectif de production annuelle	130 tonnes
Teneur de coupure	20 mg/L
Temps d'attente minimal	90 Jours
Dates d'ouverture du bloc 2	361 jours
Dates d'ouverture du bloc 3	736 jours
Dates d'ouverture du bloc 4	1147 jours
Ordre d'ouverture des blocs	PB_A ⇒ PB_B ⇒ PB_C ⇒ PB_D
Courbe de production à utiliser	P_{10} ou P_{90}

TABLE 9.5 – *Paramètres d'entrée des calculs de plans miniers à dates imposées*

La comparaison des productions entre le cas optimiste, le cas de référence et le cas pessimiste est présentée sur le graphique de production 9.4 et sur le tableau de production annuelle 9.6.

Deux années particulières sont à noter par rapport au respect de l'objectif de production sur le tableau 9.6. Dans la première année du cas pessimiste, la production de la zone ne permet pas d'atteindre l'objectif. Il faut attendre la deuxième année où deux blocs sont en production pour l'atteindre.

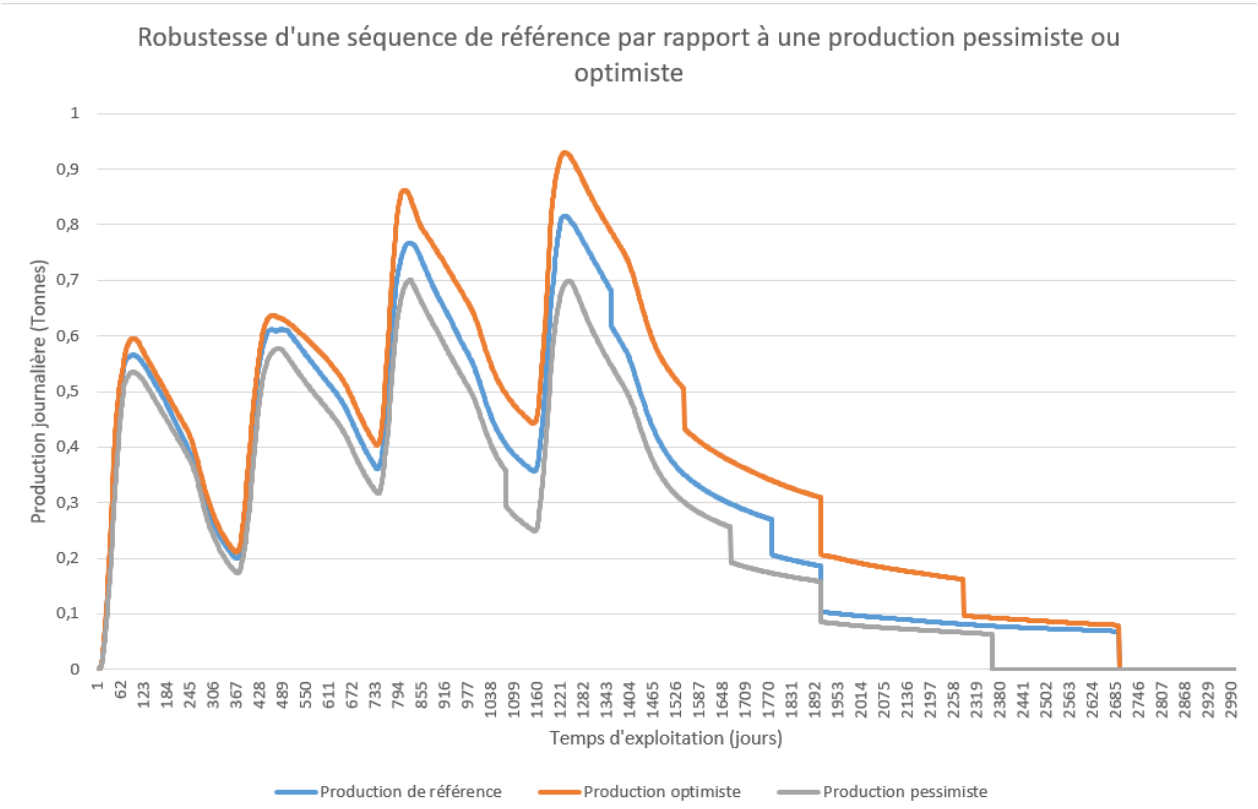

FIGURE 9.4 – *Comparaison des productions de la zone dans les cas pessimiste, optimiste et de référence avec les même dates d'ouverture imposées*

Année d'exploitation	An 1	An 2	An 3	An 4	An 5	An 6	An 7	An 8
Production pessimiste	126.6	159.1	187.3	176.4	95	37.5	13.7	0
Production de référence	136	176.4	209.5	214.6	118.3	45.2	28.6	12.5
Production optimiste	143	187.5	239	258	155.7	82.6	42.4	14.3

TABLE 9.6 – *Résultats de production annuelle des différents plans miniers calculés en tonnes d'uranium*

Au cours de la quatrième année du cas optimiste, l'ouverture des blocs avec la séquence minière imposée et les P_{90} de production est beaucoup trop rapide. La séquence d'ouverture et de fermeture conduit à une importante sur-production lors de la quatrième année. Elle est environ égale à deux fois la valeur de l'objectif de production.

Le graphique 9.4 présente l'évolution de la production annuelle au cours de l'exploitation en utilisant la séquence minière de référence dans les trois cas de production des blocs : pessimiste, référence et optimiste. Comme attendu, on observe une divergence des productions. Ceci provient des différences de production de chaque bloc selon les cas. On peut par ailleurs noter l'importance de la valeur du seuil de coupure, notamment entre les troisième et quatrième pics de production, aux alentours de 1050 jours de production. On voit sur la courbe de production pessimiste une forte diminution instantanée de la production qui correspond à l'arrêt de production du premier bloc. Ainsi, outre le fait que les courbes P_{10} ont une plus faible valeur de production, ceux-ci atteignent plus rapidement la valeur du seuil de coupure. Cet effet est également flagrant au-delà de 1600 jours, après la retombée du quatrième pic où l'on voit l'impact de la fermeture successive des différents blocs mis en production. Ainsi, le respect de l'objectif de production sur de très longues durées, non modélisé ici, dépend énormément de la date d'arrêt de production des blocs. Cette date d'arrêt dépend de la durée d'exploitation simulée et de la teneur de coupure choisie.

9.5 Bilan

9.5.1 Conclusion

L'utilisation du modèle GSM_UQ permet de propager l'incertitude de production de quatre blocs dans le calcul d'un plan minier. Les résultats montrent que l'incertitude de production représentée à l'aide de huit réalisations conditionnées aux puits d'exploration et de développement est suffisante pour induire de très grandes différences de date d'ouverture des blocs de production. De plus, les variations de production des blocs sont suffisantes pour risquer de ne pas atteindre l'objectif de production ou le dépasser très fortement. Cette étude de propagation d'incertitude dans le calcul de séquence minière met de plus en évidence l'importance de l'incertitude sur la queue de production dans le calcul de séquence minière en influençant la date de fermeture des blocs.

Le modèle GSM_UQ est donc testé dans un cas pessimiste, un cas médian, et un cas optimiste dans le but de propager l'enveloppe d'incertitude de la production des blocs dans le plan minier. Les dates et les productions de la zone calculées grâce au modèle GSM_UQ présentent une très grande sensibilité à la production des blocs utilisée en entrée. Ainsi, avoir une idée de l'incertitude sur la production des blocs est cruciale pour permettre d'estimer l'incertitude sur la séquence minière.

9.5.2 Perspectives

Ces résultats sont la preuve de l'importance d'étudier plus en profondeur la répercussion de l'incertitude de production dans le calcul de planification. GSM_UQ peut être utilisé de diverses manières pour prolonger cette étude. Par exemple en faisant une analyse de sensibilité exhaustive des paramètres d'entrée de GSM_UQ. Les principales méthodes considérées sont par exemple décrites dans [Saltelli et al., 2004]. Ceci permettra de déterminer précisément l'importance des paramètres tels que le temps d'attente minimum entre deux blocs, la teneur de coupure ou l'objectif annuel de production.

Au cours des cas d'applications présentés dans ce chapitre, le choix des courbes de production des blocs en entrée de GSM_UQ suppose les blocs indépendants. On néglige l'effet de fluctuation statistique spatiale des simulations à l'origine des réalisations. L'effet de fluctuation des propriétés tend à compenser dans une même réalisation globale un bloc pessimiste avec un voisin optimiste, puisque globalement l'ensemble se moyenne autour de la référence. Ainsi, dans le respect des variations du champ spatiales autour des données de puits, si un bloc est pessimiste ou optimiste, son voisin dans la réalisation aura toutes les chances d'être différent pour obtenir une moyenne semblable à celle des données. Il est donc pertinent de chercher à prendre en compte ces relations au moment du choix des productions en entrée de GSM_UQ. Deux principales solutions peuvent être envisagées. La première consiste à supprimer l'interdépendance entre les réalisations. Pour cela il faut adapter l'échelle des domaines de simulations géostatistiques pour n'avoir qu'un bloc par réalisation. L'autre manière est de prendre en compte la continuité spatiale de la variabilité des propriétés sur l'ensemble de la zone en effectuant la réduction de scénarios à l'échelle des quatre blocs simultanément.

Les courbes P_{10}, P_{50} et P_{90} ont été sélectionnées à chaque pas de temps parmi les productions de huit blocs. Ainsi, ces courbes ne correspondent pas à une unique réalisation sur laquelle s'appuyer dans la propagation. Afin de propager l'incertitude à partir de courbes de production des réalisations et de quantifier l'incertitude sur les résultats de GSM_UQ, il serait intéressant de propager cette incertitude via un algorithme de Monte-Carlo en sélectionnant aléatoirement la production d'une réalisation pour chaque bloc selon la pondération associée.

D'autres manières d'utiliser cette incertitude sur les courbes de production des blocs peuvent être envisagées. Par exemple, elle pourrait être intégrée comme une contrainte dans le calcul de l'ordre d'exploitation des blocs et de la séquence minière. L'objectif serait de calculer un ordre et une séquence minière minimisant le risque de ne pas respecter l'objectif de production annuel.

9.5.3 Discussion

Le modèle GSM_UQ présente cependant quelques limitations provenant des hypothèses mises en place à sa conception. Elles proviennent principalement du temps nécessaire au développement

de l'outil. On notera dans GSM_UQ la non prise en compte de la production de l'année précédente. Ni l'objectif de production annuelle, ni la consigne de production ne sont réactualisés en prenant en compte la sur-production ou sous-production de l'année précédente. Ceci permettrait une meilleure gestion de la production qui tendrait à donner un résultat annuel plus proche de l'objectif. La limitation de la sur-production permettrait de produire à hauteur de l'objectif annuel pendant plus longtemps.

De plus, aucune contrainte liée au transport hydraulique des fluides allant des blocs de production à l'usine de traitement n'est utilisée. Si l'outil se développe pour prendre en compte plus de blocs de production, l'ajout de cette contrainte dans le calcul du plan minier permettra de rapprocher GSM_UQ de la chaîne de décision du modèle GSM de calcul de plan minier.

Enfin, on cherche à trouver une solution d'un système très sous-contraint par rapport à la réalité opérationnelle. La production nulle à l'instant initial, la faible fréquence d'ouverture des blocs et la consigne de production journalière inférieure au pic de production d'un bloc donne un calcul de planification et un résultat de production atypique. La production des blocs au cours du temps devrait être bien plus lisse et régulière. L'exploitation de la mine au cours d'une année comporte une dizaine de bloc à la phase du pic au lieu d'un seul. Ainsi, afin d'améliorer grandement la pertinence des résultats, il serait intéressant de tester la propagation d'incertitude de production dans le calcul de séquence minière dans le modèle GSM. Ce modèle plus complet prend en compte des paramètres supplémentaires et permet le calcul sur l'ensemble des blocs de production.

De nombreux phénomènes sont à prendre en compte dans la modélisation de la production des blocs dans un but de propagation dans le plan minier. Les paragraphes suivants discutent de certains de ces points.

Quel que soit le modèle, afin d'améliorer la pertinence prévisionnelle des résultats, il est nécessaire de mieux considérer la fin de vie des blocs. Plusieurs points sont à prendre en compte. Tout d'abord, une bonne quantification de l'incertitude de la queue de production est nécessaire. Celle-ci, couplé au seuil de coupure, est particulièrement importante dans le calcul de la date de fermeture d'un bloc, et donc dans la prévision de production et d'atteinte des objectifs.

De plus, il est extrêmement important de prendre en compte les effets du colmatage dans la planification. Le colmatage des puits producteurs modifie à la fois la production durant l'exploitation, mais modifie aussi grandement la date de fermeture d'un bloc. Les opérations de décolmatage possèdent aussi un coût financier non négligeable. Le colmatage n'étant pas systématique, il est une grande source d'incertitude.

Enfin, le troisième phénomène important à modéliser est la dépendance entre les blocs durant l'exploitation. Les simulations ISR-U sont effectuées indépendamment dans les différents blocs. Les résultats de production des blocs ne prennent donc pas en compte les interactions entre eux. Cependant, modéliser ces interactions nécessite d'avoir une date d'ouverture des blocs. Il s'agira donc d'une hypothèse à effectuer en amont du résultat du calcul du plan minier.

Chapitre 10

Construction de modèles de substitution du code de résolution de la chimie

10.1 Contexte de l'étude

10.1.1 Présentation de la problématique

Le transport réactif permet la modélisation des écoulements en milieu poreux, le transport d'espèces chimiques et les réactions du fluide et de ses solutés avec le milieu poreux. Le couplage des processus est complexe. La simulation se fait via une discrétisation spatiale et temporelle du système. De plus, l'exactitude de la solution du transport réactif nécessite de faire converger la résolution du transport et la résolution de la chimie dans chaque voxel à chaque pas de temps en un certain nombre d'itérations. En effet la composition du fluide transporté impacte la spéciation chimique, et vice-versa. Plus de détails ont été présentés au chapitre 3.

À un instant t dans un voxel donné pour une itération particulière, la chimie est résolue indépendamment du reste du système. La spéciation est obtenue par résolution des équations non-linéaires des réactions considérées dans le voxel. Ces équations permettent de traduire les concentrations en composantes de base en espèces secondaire. Pour l'ISR et sa chimie, les composantes de base et leurs espèces secondaires associées sont par exemples :

Composantes de bases	Espèces secondaires mobiles	Espèces secondaires immobiles
H^+	OH^-, ...	Calcite, Uraninite, Beidellite, Goethite
SO_4^{2-}	HSO_4^-, ...	-
UO_2^{2+}	U^{4+}, ...	Uraninite
Ca^{2+}	$CaOH^+$, $CaSO_4(aq)$, ...	Calcite
HCO_3^-	CO_3^{2-}, H_2CO_3...	Calcite
Fe^{3+}	Fe^{2+}, $Fe(OH)_3(aq)$, ...	Goethite, Beidellite
$SiO_2(aq)$	$HSiO_3^-$, ...	Cristoballite, Beidellite
Al^{3+}, Mg^{2+}	...	Beidellite

TABLE 10.1 – *Composantes de base et espèces secondaires associées dans le cas de l'ISR*

La résolution du système d'équations est effectuée à l'aide de la méthode itérative Newton-Raphson. Le nombre de résolution nécessaire dans une simulation de transport réactif fait que la spéciation représente la majeure partie du temps de calcul. L'ordre de grandeur est estimé au delà de 50%, et jusqu'à 80% selon les experts.

Or, on remarque au cours des simulations de transport réactif qu'il y a une résolution répétée de systèmes de réactions avec des concentrations fortement similaires. L'indépendance des voxels vis-à-vis de la résolution de la chimie, la quantité de données disponible et les similitudes entre les réactions nous permettent d'envisager l'utilisation d'un méta-modèle de la résolution de la chimie basé sur un processus d'apprentissage statistique. Dans chaque voxel, les paramètres d'entrée seraient donc les composantes de base, et les paramètres de sortie les espèces secondaires. L'utilisation de méta-

modèles permettrait de diminuer significativement le temps de calcul de la simulation de transport réactif.

L'utilisation de méta-modèles dans les simulations de transport réactif est un domaine récent. En effet, peu de travaux peuvent être recensés dans la littérature : [Jatnieks et al., 2016], [Laloy and Jacques, 2019], [De Lucia et al., 2017], [Leal et al., 2017] et [Leal et al., 2020]. Cependant, aucun d'entre eux n'a testé l'utilisation de méta-modèles sur un système tel que l'ISR.

10.1.2 Travaux et plan du chapitre

Les travaux exploratoires de l'utilisation de méta-modèles dans le transport réactif ont fait l'objet d'un stage de quatre mois au cours duquel j'ai supervisé et travaillé avec Hermon Alfaro-Olivos, élève du cycle ingénieur civil de l'école des Mines.

Au cours de l'étude, deux cas d'application ont été abordés et font l'objet des deuxième et troisième parties du présent chapitre. Le premier cas correspond au modèle de transport réactif présenté dans les travaux de Leal et al. [2017]. Le deuxième cas d'application correspond à une exploitation d'uranium par ISR simplifiée. La quatrième partie correspond à l'analyse et à la discussion des résultats.

10.2 Applications

10.2.1 Dissolution 1D de calcite

Modèle de transport réactif

Dans leurs travaux exploratoires pour l'utilisation d'un modèle de substitution au solveur de la chimie, Leal et al. [2017] se sont appuyés sur un modèle de transport réactif 1D. Il s'agit d'une colonne d'un mètre composée à 98% de quartz et à 2% de calcite avec une porosité de 10%. Le fluide injecté percole à une vitesse de darcy d'un mètre par jour. Le coefficient de diffusion est de $10^{-9}\mathrm{m}^2/\mathrm{s}$. La solution est un mélange de 0.90 mol/kg de NaCl, 0.05 mol/kg de $MgCl_2$, 0.01 mol/kg de $CaCl_2$ et 0.75 mol/kg de CO_2 dissous. Le pH résultant est de 4.65. La température et la pression du système sont respectivement de 60 degré Celsius et de 100 bar. Le temps simulé est de 20 heures. La discrétisation spatiale de la colonne est constante et est de un centimètre.

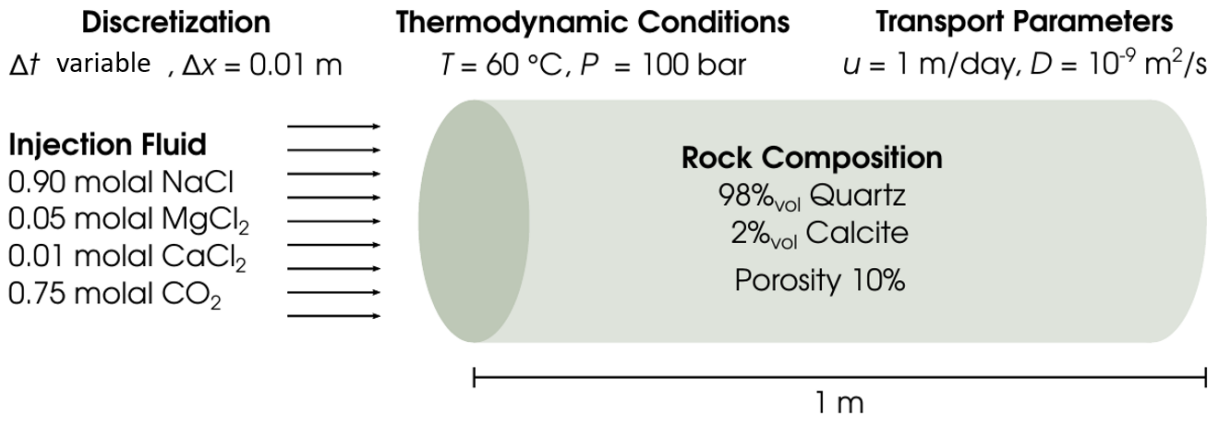

FIGURE 10.1 – *Premier modèle de transport réactif utilisé pour développer un méta-modèle. Le modèle est présenté dans les travaux de Leal et al. [2017] pour développer un modèle de substitution au solveur de la chimie*

Base d'apprentissage

Dans ces travaux, la base de donnée servant à l'entraînement du méta-modèle est construite à l'aide d'une première simulation de transport réactif que l'on considère comme une boîte noire. Pour

cela, le logiciel Hytec développé au Centre de Géosciences est modifié avec l'aide de Jérôme Corvisier, enseignant-chercheur de Mines ParisTech. La modification permet l'écriture sous format ASCII des inputs et outputs du solveur de la chimie, CHESS. Une donnée correspond aux inputs-outputs de CHESS à un voxel donné, à un pas de temps donné et lors d'une itération. Les paramètres d'entrée du solveur sont les concentrations totales de chaque composante de base du système chimique, les surfaces de réaction, la pression et la température. La pression et la température sont constantes au cours de la simulation. La sortie du solveur est constituée des concentrations des espèces secondaires mobiles et immobiles. Chaque donnée est composée de 9 prédicteurs et 27 variables à prédire.

La base de données résultant de cette simulation représente 1 974 200 échantillons pour une taille de 820 Mo. Elle est divisée en deux parties. 80% de celle-ci est utilisée pour servir d'entraînement, et 20 % pour servir de test et de validation du modèle. Hytec simule l'écoulement, le transport et les réactions sur une durée de 20 heures, et le calcul prend 2 minutes avec Hytec.

Il est important lors de l'ajustement de méta-modèles d'étudier la gamme de variation des paramètres d'entrée. La construction du jeu d'apprentissage se fait habituellement par un échantillonnage de l'espace des paramètres, généralement considéré comme un hypercube dont la dimension est le nombre de paramètres d'entrée, et ses extensions sont les intervalles de variation des paramètres. Dans ce travail, les gammes de variation des paramètres et leurs éventuelles dépendances sont inconnus. C'est pourquoi nous avons construit notre base d'apprentissage à partir d'une simulation Hytec.

Algorithme des k plus proches voisins

Le premier méta-modèle utilisé est celui des k plus proches voisins, ou *k-nearest-neighbors* (KNN) en anglais [Peterson, 2009]. Le principe des KNN est de prédire la sortie grâce à une pondération des sorties des k plus proches voisins dans l'espace des paramètres. La sélection des voisins est faite d'après le calcul d'une distance (à définir) entre les entrées de la prédiction recherchée et les entrées enregistrées dans la base de données. Le KNN est un modèle de substitution simple et répandu idéal pour notre premier cas d'application lui aussi relativement simple. De plus, le KNN permet de pondérer la sortie à prédire en fonction de l'éloignement des entrées de la prédiction avec les entrées des voisins. Cela permettra de prendre en compte dans la prédiction les réactions égales ou similaires.

Le formalisme mathématique nous permet d'écrire les choix d'implémentation utilisés. Tout d'abord, on définit l'espace métrique des entrées $\mathrm{X} = \mathbb{R}^m$ avec m le nombre de prédicteurs. La distance $d^{(i)}$ entre les données x et $x^{(i)}$ de cet espace est définie comme la distance euclidienne : $d^{(i)} = \sqrt{\sum_{j=1}^{m}(x_j - x_j^{(i)})^2}$. La norme permet de calculer les distances entre échantillons et de sélectionner les voisins. On définit ensuite l'espace des sorties $\mathrm{Y} = \mathbb{R}^n$ avec n le nombre de variables à prédire. Une observation i de la base de données parmi les p exemples, est donnée par le couple $(x^{(i)}, y^{(i)}) \in X \times Y, \forall i \in p$.

La prédiction $\hat{y}$ par KNN à partir des k plus proches voisins selon la distance euclidienne est donnée par l'équation 10.1 :

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^{k} \omega^{(i)} y^{(i)} \tag{10.1}$$

On choisit la pondération $\omega^{(i)}$ de chaque voisin i comme inversement proportionnelle à la distance avec l'exemple à prédire. Pour k plus proches voisins, on obtient l'expression :

$$\omega^{(i)} = \frac{\frac{1}{d^{(i)}}}{\sum_{j=1}^{k} \frac{1}{d^{(j)}}} \tag{10.2}$$

Le nombre de voisins utilisés pour la prédiction est égal à 3. Il a été choisi par essais-erreurs en s'appuyant sur le coefficient de détermination, comme expliqué dans le prochain paragraphe. Le premier cas d'application a été développé en python.

Résultats de prédiction

Afin de mesurer la qualité de la prédiction d'un modèle, on entraîne celui-ci sur un jeu d'entraînement, puis on quantifie l'erreur lors de la validation sur un jeu de test. Il existe différentes manières de quantifier cette erreur, par exemple l'erreur quadratique moyenne, l'erreur absolue moyenne... Dans notre cas on utilise le coefficient de détermination R^2 sur N prédictions, et dont la formule est rappelée en 10.3. $\hat{y}_i$ est la valeur de la prédiction i du jeu de test. $\overline{y}_i$ est la moyenne des sorties du jeu de test.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N} y^{(i)} - \hat{y}^{(i)}}{\sum_{i=1}^{N} y^{(i)} - \overline{y}} \tag{10.3}$$

Le R^2 permet de rapidement évaluer la précision de la prédiction. Une valeur de 1 indique une précision parfaite, une valeur de 0 lorsque la prédiction est aussi efficace que de prédire la moyenne des sorties pour chaque entrée du jeu de test et une valeur négative lorsque les prédictions sont moins bonnes que l'utilisation de la moyenne.

Le coefficient de détermination est supérieur à 99% pour chaque variable à prédire avec le jeu test de données. Ainsi, le méta-modèle par KNN arrive à prédire pratiquement parfaitement la valeur des sorties.

Le temps de prédiction est de 1.7 minutes. Le gain de temps est faible, voir nul, en considérant qu'en plus de la chimie, Hytec résout aussi l'écoulement et le transport.

Analyse de l'utilisation des KNN

La réduction du temps de calcul par le méta-modèle montre la limite des KNN. En effet, pour chaque prédiction, l'algorithme a besoin de trouver ses plus proches voisins. Cela nécessite de calculer la distance avec l'ensemble des données disponibles, et ensuite de trier les données par proximité. Les KNN montrent donc une limite dans le cas où la base de données est de grande taille. Étant donné les bonnes prédictions de l'algorithme, on peut cependant conclure qu'il est effectivement possible d'utiliser un méta-modèle de la résolution de la chimie pour certaines simulations de transport réactif.

10.2.2 ISR-U d'une seule cellule de production

Présentation du cas d'étude

Le deuxième cas d'application concerne l'ISR. Un modèle d'exploitation plus petit que ceux utilisés pour la modélisation de l'exploitation des blocs de production est utilisé. Le modèle est en 3 dimensions et ne comporte qu'une cellule de production composée d'un puits producteur et de six puits injecteurs. La grille du réservoir est composée d'environ 52 000 voxels. Trois propriétés sont définies dans la grille : le lithotype qui contraint la répartition spatiale de la perméabilité, le faciès OMR qui définit les zones géochimiques, et la teneur en uranium dans le faciès minéralisé. Le milieu est hétérogène. L'hétérogénéité est importante pour la construction de la base de données car elle va permettre d'échantillonner efficacement les valeurs d'entrée possibles de CHESS. À la différence du cas de la section précédente où toutes les réactions sont à l'équilibre, dans le modèle de l'ISR certaines réactions sont sous contrôle cinétique.

Construction de la base de données

Afin de générer une base d'apprentissage pour entraîner un méta-modèle, une simulation de l'exploitation par transport réactif est effectuée avec Hytec. Les paramètres d'entrée et de sortie de chaque résolution de la chimie sont sauvegardés en ASCII. Les paramètres d'entrée sont la température, la pression, la concentration totale de chaque composante de base et la durée du pas de temps. La durée du pas de temps est désormais nécessaire en raison du contrôle cinétique des réactions. Ainsi, la base de données est composée de 17 variables d'entrée, et de 99 espèces mobiles et immobiles à prédire.

En raison de la taille du modèle, du nombre d'espèces en jeu, et du format de la base de données, son volume augmente rapidement avec la durée simulée. Ainsi, trois bases de données sont constituées pour trois durées d'exploitation simulées. Les trois durées sont 12h, 24h et 5 jours. Ainsi, pour une durée d'une demi-journée, la base de données représente 2.5 Go et environ 1 684 800 données, pour une journée, celle-ci fait 4.5 Go et 2 995 200 exemples, et pour 5 jours la base de données fait 16.5 Go et 10 904 400 échantillons. L'augmentation de la taille des bases de données n'est pas linéaire avec la durée simulée car le pas de temps au cours de la simulation est variable. Le tableau 10.2 présente les différentes valeurs. Le temps de création correspond au temps nécessaire à la simulation Hytec pour effectuer les calculs et l'écriture de la base de données.

Durée simulée	Temps de création	Taille de la BDD	Nb de données
0.5 jour	11.3 min	2.5 Go	1 684 200
1 jour	19.7 min	4.5 Go	2 995 200
5 jours	67.2 min	16.5 Go	10 904 400

TABLE 10.2 – *Temps de création, taille de la base de données et nombre d'exemple dans la base pour chacune des trois durées simulées*

De même que pour le KNN, la base de données est divisée aléatoirement en deux. 80% de cette base va servir à entraîner le méta-modèle, et les 20% restant serviront de base de test.

Afin de ramener tous les paramètres dans la même échelle de valeurs pour faciliter l'apprentissage, un pré-traitement est effectué. Les paramètres d'entrée sont standardisés et les paramètres de sortie sont normalisées sur leur gamme de variation de valeurs. La valeur z standardisée d'un paramètre à partir d'une valeur initiale x est donnée par la formule $z = \frac{x-\mu}{\sigma}$, μ_i est la moyenne du paramètre i, et σ_i son écart-type. La valeur normalisée y_{norm} d'un paramètre est donnée par la formule $y_{norm} = \frac{y-y_{min}}{y_{max}-y_{min}}$.

Présentation des réseaux de neurones profonds

L'algorithme des KNN a été testé dans le premier cas. En revanche, on a vu la limite de son utilisation dans les très grandes bases de données. Ainsi on se tourne plutôt vers un algorithme capable de gérer les très grandes quantités de données. Il s'agit des réseaux de neurones profonds, ou deep neural networks en anglais (DNN). Ce type de méta-modèle a déjà été utilisé dans la littérature, Jatnieks et al. [2016], De Lucia et al. [2017]. Il permet d'approcher des systèmes de relations non linéaires entre des entrées et sorties, mais nécessite en contrepartie une importante base d'apprentissage. L'entraînement d'un DNN peut être coûteux en temps, mais le temps de chaque prédiction est très faible.

Les DNN se construisent à partir d'une unité de calcul de base : le neurone. Le premier neurone décrit fut le perceptron dans les travaux de Rosenblatt [1961]. Un perceptron donne une unique sortie binaire en appliquant une fonction d'activation sur la somme d'une combinaison linéaire des paramètres d'entrée et d'un paramètre de biais. Le perceptron permet la classification d'un vecteur. D'autres fonctions d'activation permettent aux neurones de prédire une sortie continue. L'organisation d'un ensemble de neurones sous forme de multiples couches permet de représenter des liens de dépendances complexes. La formalisation du j ème neurones de la i ème couche, à partir d'un vecteur de paramètre d'entrée x, se fait selon l'équation 10.4.

$$h_i^{(j)}(x) = f_i^{(j)}(W_i^{(j)}x + b_i^{(j)}) \tag{10.4}$$

Dans cette équation, f est la fonction d'activation de chaque neurone de la couche, W est la matrice des coefficients des données d'entrée des neurones, et b le vecteur des biais. Les entrées d'une couche sont les sorties de la précédente. La prédiction $\hat{y}$ à partir des entrées de la base d'apprentissage s'écrit comme la composition des différentes formules des k couches, et donne l'équation 10.5. g est la fonction d'activation de la sortie.

$$\hat{y} = g \circ h_k \circ h_{k-1} \circ \cdots \circ h_1 = g \circ \cdots \circ f_1(W_1 x + b_1) \tag{10.5}$$

La figure 10.2 présente un schéma d'un réseau de neurones profond multi-couches. Il s'agit d'un réseau composé de plusieurs couches denses de neurones complètement connectées. La couche d'entrée est composé d'un neurone par paramètre d'entrée, de même que la sortie. La prédiction se fait dans cet exemple d'un espace à 3 dimensions dans un espace à deux dimensions, avec trois couches cachées de neurones.

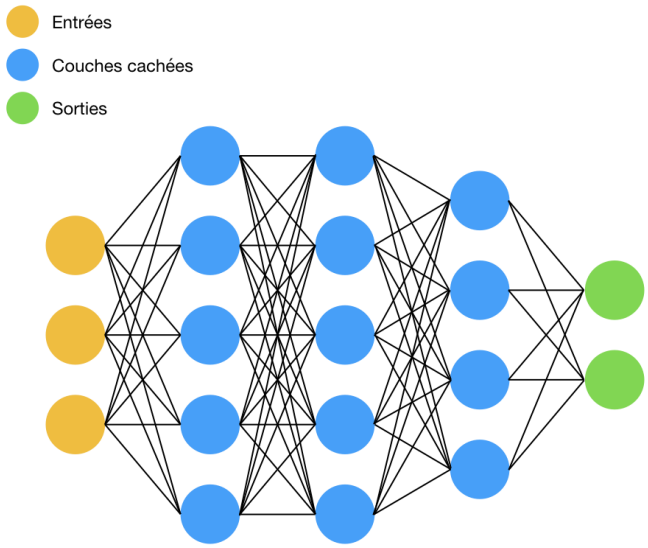

FIGURE 10.2 – *Schéma d'un réseau de neurones profonds, d'après Nativel-Fontaine and Audrix [2018]*

L'entraînement du DNN consiste à ajuster les paramètres du méta-modèle pour obtenir la sortie la plus précise possible. L'entraînement se fait via la minimisation d'une fonction de perte, ou fonction objectif, L. Une des formes les plus simples avec p données d'entraînement en est :

$$L(y, \hat{y}) = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{p} (l(y_i, \hat{y}_i))$$

avec $L : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}$, où y représente le vecteur des m sorties réelles d'une donnée de la base d'apprentissage, et $\hat{y}$ les m prédictions de cette donnée. La fonction coût l, est la fonction de mesure d'écart entre la prédiction et la valeur de la donnée. Pour les problèmes de régression, les fonctions l courantes sont l'erreur quadratique, l'erreur absolue, ou le logarithme du cosinus hyperbolique. La fonction L est dérivable, et ses paramètres peuvent donc être optimisés à l'aide d'une descente de gradient. La descente de gradient est un processus itératif effectué en ajustant les différents paramètres optimisables. Les paramètres de la fonction objectif sont les coefficients des combinaisons linéaires W et le vecteur de biais b pour chaque couche. L'optimisation du réseau a longtemps été un problème non résolu en raison de la quantité exponentielle de paramètres à ajuster. Les calculs de dérivée de la fonction objectif sont effectués itérativement à partir du résultat de prédiction en considérant l'erreur de prédiction et les poids associés. Il s'agit de l'algorithme de *back-propagation* développé par Hecht-Nielsen [1992] basé sur la règle de dérivation en chaîne. La minimisation de la fonction objectif est effectuée grâce à l'utilisation de gradient stochastique.

Hyperparamètres du DNN

Un DNN particulier dépend d'un certain nombre d'hyperparamètres qui décrivent sa structure et la façon dont il s'entraîne.

Les hyperparamètres de la structure du DNN sont le nombre de couches et le nombre de neurones pour chaque couche. Lors du choix de ces deux hyperparamètres, il est important de noter que le nombre de coefficients à ajuster lors de l'entraînement augmente fortement le temps d'entraînement. Il impacte énormément le temps d'entraînement nécessaire. Dans notre cas, la structure du DNN est

choisie par essai erreur. Il est composé d'une couche d'entrée à 17 neurones, puis de quatre couches cachées à 17 neurones, puis de cinq couches cachées à 99 neurones, et enfin de la couche de sortie à 99 neurones.

À chaque couche est associée une fonction d'activation (cf équation 10.4). De même que pour la structure, le choix de la fonction d'activation par couches est fait par essai erreur pour obtenir le meilleur résultat de prédiction possible. Dans notre cas, la fonction d'activation de la couche d'entrée (f_1 sur l'équation 10.5) est donnée par la fonction LeakyReLu définie par :

$$f_1 = \begin{cases} \alpha x & \text{si } x < 0; \alpha \in (0,1) \\ x & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

α est égal à 0.3. La fonction d'activation ReLu est utilisée pour chacune des couches cachées. Elle est définie par :

$$f_1 = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ x & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

Et enfin, la fonction identité est utilisée comme fonction d'activation de la couche de sortie (g sur l'equation 10.5).

La fonction de perte utilisée pour quantifier la qualité de la prédiction du méta-modèle est aussi un hyperparamètre. Le logarithme du cosinus hyperbolique est choisi comme fonction de perte. Elle fonctionne comme l'erreur absolue moyenne pour de fortes erreurs, et comme $x^2/2$ pour de faibles erreurs. Cela permet d'avoir une fonction relativement simple et dérivable en tout point, y compris lorsque la valeur prédite est très proche de la valeur à prédire.

L'algorithme d'optimisation des paramètres utilisés lors de l'entraînement est AdaMax, développé par Kingma and Ba [2014]. Ces choix ont été fait pour améliorer la prédiction des faibles valeurs de concentration.

L'entraînement est contrôlé par deux hyperparamètres : la taille des *batches*, et le nombre d'*epochs*. La taille des *batches* correspond au nombre de données du sous ensemble du jeu d'entraînement utilisés lors du calcul du gradient stochastique. Le nombre d'*epochs* est le nombre de boucles effectuées sur l'ensemble de la base d'apprentissage lors de l'entraînement. Ces deux paramètres permettent un certain contrôle du temps d'apprentissage de l'algorithme. Dans notre cas, le nombre de *batches* est 80 000, et le nombre de d'*epochs* est 25. Le nombre d'*epochs* est choisi selon les capacités de calcul disponible.

Le réseau possède les mêmes hyperparamètres pour les trois jeux de données. Le prototype est développé en python.

Résultats de prédiction

Une fois les hyperparamètres du réseau choisis et ajustés, il est utilisé pour prédire les valeurs de sortie du solveur chimique. Le tableau 10.3 présente pour chacune des durées simulées, le temps de la simulation ISR, le temps nécessaire à l'entraînement du DNN, et le temps nécessaire au DNN pour prédire l'ensemble des solutions (1 684 200, 2 995 200 et 10 904 400 exemples) du solveur de la chimie de la simulation ISR.

	12h simulées	24h simulées	5 jours simulées
Durée de la simulation	0.19 h	0.33 h	1.12 h
Durée de l'entraînement	0.12 h	0.22 h	0.83 h
Durée de la prédiction	0.07 h	0.1 h	0.33 h

TABLE 10.3 – *Tableau de synthèse des temps de simulation ISR, d'entraînement et de prédiction pour chacune des trois bases de données du cas ISR*

On observe que le temps d'entraînement du DNN ajouté au temps nécessaire au temps de prédiction est similaire au temps de simulation de l'ISR par transport réactif. Cependant, le temps de prédiction en tant que tel ne représente qu'un tiers du temps de simulation de l'ISR.

La précision de la prédiction pour chaque espèce est donnée, comme pour le cas d'application précédent, par le coefficient de détermination entre la valeur réelle des sorties du jeu de test, avec la valeur prédite du jeu de test. Le tableau 10.4 présente les coefficients de détermination pour quelques-unes des espèces les plus importantes dans l'ISR pour chacun des jeux de données.

Espèce	12h simulées	24h simulées	5 jours simulées
Uraninite	0.97	0.63	0.93
Fe[3+]	0.99	0.92	0.6
Fe[2+]	0.99	0.99	0.98
Calcite	0.99	0.99	0.99
Ca[2+]	0.99	0.96	0.99
Goethite	0.99	0.96	0.95
Beidellite-Mg-Fe	0.99	0.85	0.68
HCO_3[-]	0.96	-0.08	0.93
Al[3+]	0.99	0.54	0.97
Mg[2+]	0.99	-0.01	0.97

TABLE 10.4 – *Coefficients de détermination pour quelques-unes des espèces entrant en jeu lors de la simulation ISR par transport réactif pour chacune des trois bases de données du cas ISR*

Les résultats obtenus pour la simulation d'une demi-journée d'ISR présentent un très bon coefficient de détermination. Cependant, cela représente très peu de temps d'exploitation, et l'on peut supposer que les paramètres d'entrée et de sortie varient peu. Ces faibles variations rendent les prédictions relativement faciles à calculer. Les coefficients de détermination des espèces prédites avec 24h d'ISR sont en revanche bien moins bons. On remarque notamment des espèces que le DNN est incapable de prédire, et dont le coefficient de détermination est proche de 0, voir négatif. Ceci s'interprète comme l'augmentation du nombre de réactions de dissolution après la phase d'acidification de certains voxels. Ainsi, la gamme de variation des données augmente fortement, mais peu de données de ces variations sont représentées. Le manque d'échantillonnage de valeurs différentes sur la gamme de variation d'entrées-sorties ne permet pas au modèle de s'entraîner efficacement, et donc ne lui permet pas de prédire précisément les résultats. Les coefficients de détermination pour cinq jours d'ISR semblent meilleurs, mais de nouvelles espèces ont cependant des coefficients de détermination très faibles. Les améliorations des coefficients de détermination proviennent de l'amélioration de l'échantillonnage des données pour certaines sorties, et certaines faiblesses de prédiction proviennent d'un sous-échantillonnage de nouvelles réactions.

Conclusion sur l'application des DNN

La comparaison du temps de simulation ISR avec le temps nécessaire au DNN pour prédire l'ensemble de la base de données montre une réduction du temps de calcul de deux tiers environ sur la durée considérée. La réduction est importante, mais la comparaison est faite avec une simulation hytec qui résout aussi l'écoulement, le transport, et gère l'écriture de la base de données. L'intégration du méta-modèle dans le code de transport réactif est nécessaire pour précisément conclure sur le gain de temps.

Les résultats de la qualité de prédiction sont globalement très bons avec un R^2 très souvent proche de 1. Cependant, l'algorithme présente des difficultés à prédire certaines espèces.

La principale raison est probablement le manque d'échantillonnage de certaines gammes de valeurs. En effet, la faible durée des simulations de l'ISR va créer un sous-échantillonnage des réactions tardives du gisement. L'exploitation du gisement ne dépasse pas la phase d'acidification qui dure

plusieurs dizaines de jours. Il n'y a donc que très peu de réactions représentées. Le modèle est moins robuste à la prédiction des spéciations avec peu d'exemples.

Finalement, la conception du modèle par essai-erreur nous a fait sélectionner le meilleur jeu d'hyperparamètres parmi ceux testés. Cependant, il est possible qu'une combinaison d'hyper paramètres plus efficace existe.

10.3 Analyse et conclusion des travaux d'exploration

10.3.1 Conclusions

Le premier essai d'utilisation de méta-modèles dans le transport réactif est fait en utilisant l'algorithme des k plus proches voisins sur un cas d'application 1D avec une chimie simple. Les résultats en terme de temps de calcul et de qualité de prédiction sont bons, mais l'algorithme montre ses faiblesses vis-à-vis de la taille de la base de données.

Le deuxième cas d'application est bien plus complexe que le premier. Le modèle ISR est en 3 dimensions, avec beaucoup plus de voxels, une importante hétérogénéité des propriétés du réservoir, plus d'espèces en présence, et avec des réactions à l'équilibre et d'autres avec un contrôle cinétique. La taille et la complexité du modèle ISR de transport réactif nous ont fait considérer les réseaux de neurones profonds comme méta-modèle. Les résultats semblent effectivement montrer un gain de temps de calcul entre la prédiction et le transport réactif, mais il est difficile de conclure sans avoir intégré le méta-modèle au sein du code de transport réactif. Vis-à-vis de la précision de la prédiction, le coefficient de détermination montre certaines espèces comme très bien prédites, et d'autres dont l'algorithme n'arrive pas à prédire la sortie en fonction de l'entrée.

10.3.2 Perspectives

Dans le but d'améliorer la prédiction du modèle, il est nécessaire d'améliorer la base de données. Pour cela, la première étape est de construire une base échantillonnant la spéciation sur une durée beaucoup plus longue. Il est donc nécessaire de résoudre les problèmes de taille de la base de données. Une solution est d'utiliser un modèle plus réduit de l'ISR, en diminuant le nombre de voxels, et en passant par exemple d'un modèle 3D à un modèle 2D. Ainsi, l'augmentation de la base de données à chaque pas de temps est moins importante. Enfin, la dernière solution pourrait être d'effectuer une sélection des exemples de réactions à sauvegarder. Un autre moyen d'améliorer la base de données est d'utiliser plusieurs modèles géologiques différents pour la constituer. Ainsi, les exemples contenus dans la base seront plus diversifiés et permettront un entraînement plus robuste du modèle. Enfin, l'amélioration du modèle pourrait passé par un entraînement basé sur la maximisation d'un autre coefficient quantifiant la qualité de la prédiction que le coefficient de détermination.

Différentes pistes peuvent être explorées pour améliorer l'entraînement du méta-modèle. La première consiste à intégrer différentes contraintes physico-chimiques au sein de la fonction de perte dans l'esprit du *physics-informed neural networks*, [Raissi et al., 2019]. On peut par exemple penser à la vérification du respect du bilan de masse et de l'équilibre des charges. Cela empêcherait la violation des lois physiques et chimiques dans la prédiction des résultats. De même, il est actuellement nécessaire de remettre à 0 les valeurs de concentrations négatives prédites car la fonction d'activation de la couche de sortie est l'identité. Il pourrait être judicieux de la remplacer par une fonction strictement positive. Il peut enfin être intéressant de considérer dans les paramètres les espèces solides présentes dans le voxel au pas de temps précédent.

Une fois le méta-modèle intégré dans le code de transport réactif, il pourrait être intéressant de réaliser son apprentissage au fur et à mesure de la simulation. On pourrait également envisager d'y faire appel uniquement lorsque les données d'entrées de CHESS seront proches (selon un critère à définir) des entrées déjà observées. Le méta-modèle rempacerait ainsi progressivement CHESS dans la résolution du transport réactif.

Afin de précisément quantifier le gain de temps de calcul, il est nécessaire de mettre en place le couplage entre le méta-modèle entraîné et les codes de transport et d'écoulement. La mise en place

de ce couplage permettra notamment de tester les éventuels risques de propagations d'erreur au cours de la simulation.

Troisième partie

Bilan

Chapitre 11

Conclusions

11.1 Conclusion générale

Chaque année, l'objectif minier d'Orano Mining est de produire par ISR au Kazakhstan environ 4000 tonnes d'uranium. Une simple variation de quelques pourcents de la production cible représente un impact économique important. Il est donc nécessaire de quantifier l'incertitude de production pour anticiper et mieux gérer les imprévus de production. Différentes sources à l'incertitude de production existent, comme par exemple l'incertitude de modélisation ou l'incertitude du scénario d'exploitation. Celle considérée au cours des travaux de cette thèse provient de la méconnaissance de la répartition des propriétés géologiques du milieu. En particulier l'incertitude à modèle donné. Les différents travaux de cette thèse présentent l'impact de la variabilité spatiale des propriétés géologiques dans la production d'uranium, et présentent différentes solutions afin de mener à bien la propagation d'incertitude.

Notre méconnaissance des propriétés du gisement est représentée par l'incertitude aléatoire lors de la géomodélisation stochastique du gisement. La modélisation de l'exploitation de l'ISR est effectuée par transport réactif. On peut donc l'utiliser pour transformer l'incertitude géologique en incertitude sur la production d'uranium. La propagation directe est présentée au chapitre 5. Elle permet d'évaluer l'impact de la répartition des propriétés géologiques du gisement sur la production d'uranium à l'échelle du bloc. L'importante variabilité des résultats de production d'uranium au sein d'un même bloc obtenus avec les différentes réalisations justifie l'intérêt d'étudier la propagation de cette incertitude. De plus, la propagation de l'incertitude en utilisant les puits d'exploration et de développement, puis les puits d'exploration, de développement et technologique montrent bien que la diminution de l'incertitude sur la répartition spatiale des variables d'intérêt se traduit en une diminution de l'incertitude sur la production d'uranium.

Cependant, le coût en temps de calcul du transport réactif est limitant. Ainsi, en contexte opérationnel, la quantification d'incertitude nécessite l'utilisation d'outils de propagation parcimonieuse. Les chapitres 6, 7 et 8 sont donc axés sur la propagation parcimonieuse de l'incertitude, et plus particulièrement sur la conception de proxys de la production d'uranium. Celle-ci permet de réduire le nombre de réalisations à utiliser pour propager l'incertitude. Nous nous sommes appliqués à la construction de trois grands types de proxys : les proxys statiques, les proxys basés sur la récupération de traceurs en solution à l'instant initial, et les proxys basés sur la lixiviation d'un minéral traceur dans le gisement. Les proxys uniquement basés sur les propriétés statiques sont extrêmement rapides à calculer. En revanche, leurs résultats reproduisent assez peu la dissimilarité de production d'uranium entre les réalisations. Le couplage des proxys statiques et des proxys basés sur la récupération de traceurs en solution permet d'améliorer l'approximation de la dissimilarité entre les production des réalisations, mais le résultat reste peu précis. Les résultats du chapitre 8 montrent que la réduction de scénarios est efficace lorsque les proxys utilisés pour reproduire la dissimilarité de la production d'uranium des réalisations approximent les contraintes cinétiques de la dissolution de l'uraninite et le transport des éléments dissous aux puits producteurs. Il s'agit de phénomènes

clés contrôlant la récupération de l'uranium. Cependant, leur utilisation rend le temps de calcul de la phase de description plus important.

On obtient donc un panel de proxys différents qui présentent différents compromis entre le temps de calcul et la précision de l'approximation de la dissimilarité.

Le calcul d'incertitude de production à l'échelle du bloc présente un intérêt en tant que tel pour évaluer la quantité d'uranium récupérable. Cependant, une des utilisations des courbes de production d'uranium est l'établissement du plan minier permettant d'atteindre l'objectif annuel de production. La gestion de la mine à grande échelle et sur le long terme nécessite d'avoir la prédiction de la production des blocs. Les travaux menés dans le chapitre 9 permettent d'apporter un début de réponse à l'impact de l'incertitude dans le plan minier. Ils ont été effectués à l'aide d'un modèle simplifié de calcul de plan minier. Les résultats montrent l'importance de la répercussion de l'enveloppe d'incertitude de production dans le calcul des dates d'ouverture et de fermeture des blocs ainsi que dans la production à l'échelle d'un ensemble de blocs. Cela démontre donc, malgré les limites du modèle utilisé, la nécessité de prendre en compte ces incertitudes dans le modèle opérationnel.

Une des contraintes à l'utilisation du transport réactif est son coût important en temps de calcul. Afin d'accélérer les simulations de transport réactif, et donc les simulations ISR-U, la substitution du solveur de la spéciation chimique par un méta-modèle dans le code de transport réactif a été étudiée. L'étude présente des résultats prometteurs sur l'ISR. Les principales tâches seront d'abord, l'amélioration du réseau en optimisant la fonction objectif, les fonctions d'activation, et la structure du réseau, puis l'intégration du méta-modèle entraîné dans Hytec. Ces travaux novateurs pourront impacter l'ensemble des applications d'Hytec.

11.2 Extension du domaine de l'incertitude

11.2.1 Intégration d'autres sources d'incertitudes

Les essais de proxys dans la réduction de scénarios ont été effectués sur deux blocs de production, et en utilisant de scénarios d'exploitation simplifiés : les débits aux puits sont constants, et la chimie des fluides injectés est simplifiée. Il serait intéressant de tester la robustesse de la réduction de scénarios à des modifications du scénario d'exploitation, et sur des géologies différentes.

Les réalisations utilisées lors des cas d'application de la réduction de scénarios ne diffèrent que vis-à-vis de la graine du générateur de nombres aléatoires. Cependant, il serait pertinent d'intégrer dans la construction du jeu de réalisations une incertitude sur les paramètres des modèles géostatistiques utilisés. Ces nouvelles incertitudes comprennent notamment les variations possibles des valeurs des paramètres des variogrammes, ou les valeurs de seuils des gaussiennes tronquées. L'ajout de ces incertitudes augmentera la variabilité des réalisations qui échantillonneront mieux l'incertitude sur la variabilité spatiale des propriétés du gisement. L'incertitude de modélisation pourrait ainsi être incorporée dans une approche bayesienne. La réduction de scénarios utilisant le proxy du minéral traceur cinétique sera efficace pour sélectionner les réalisations. Il est conçu dans le but de reproduire la dissimilarité induite par la répartition spatiale des propriétés géologiques. Cependant peu importe la méthode utilisée pour intégrer l'incertitude de modélisation, cela augmenterait considérablement le nombre de réalisations à considérer et à traiter. La prise en compte de l'incertitude de modélisation augmente exponentiellement la dimension de l'espace des réalisations considérées et donc le nombre de réalisations nécessaires pour être représentatives de l'incertitude.

D'autres sources d'incertitudes influencent la récupération de l'uranium, telles que les valeurs des coefficients thermodynamiques des réactions chimiques, la concentration des minéraux dans chaque faciès, ou la perméabilité des sables. Le choix de ces paramètres en amont des simulations ISR-U est effectué à l'aide des données de la littérature, d'expériences de laboratoire et de l'expertise des modélisateurs. Cependant, le passage des propriétés de l'échelle de l'échantillon à celui du bloc

est particulièrement complexe. Différents travaux non publiés d'analyse de sensibilité réalisés par Tatiana Okhulkova lors de son post-doc permettent d'établir une hiérarchisation des variables selon leur impact sur la production d'uranium. Cependant ces études ont été effectuées sans considération de la variabilité spatiale.

À l'heure actuelle, les paramètres d'entrée sont ajustés au cours de l'exploitation à la main par les opérateurs miniers pour caler les résultats de simulation aux données de production. Les futurs travaux de thèse d'Antoine Collet ont pour objectif d'automatiser le calage des résultats de simulation et d'apporter des solutions au problème inverse de la répartition spatiale des propriétés du gisement. On peut trouver dans la littérature de l'industrie pétrolière et gazière divers exemples de couplage de l'history matching avec la réduction de scénarios pour ajuster les paramètres des réalisations sélectionnées à la production dans un but de réduction d'incertitudes (par ex. [Arnold et al., 2016]).

Le couplage de l'analyse de sensibilité, de la réduction de scénarios et de l'history matching permettrait de mieux définir les relations entre les paramètres d'entrée et leur impact sur la production d'uranium. Par exemple, les répartitions spatiales des faciès géochimiques et du lithofaciès influencent la production de réactifs importants dans la dissolution de l'uraninite. En revanche, les capacités de calcul nécessaires pour résoudre ce problème sont particulièrement importantes, et il serait nécessaire de bien définir les corrélations dépendance des paramètres d'entrée.

Une dernière source non considérée d'incertitude dans ces travaux correspond à la décroissance des débits au cours de l'exploitation. En effet, le phénomène de colmatage des puits au cours de l'exploitation crée une diminution du flux hydrique pompé aux puits producteurs. La vitesse et la localisation des colmatages et la fréquence des décolmatages sont difficilement prévisibles et entraînent d'importantes variations de production d'uranium. La caractérisation des colmatages a fait l'objet des travaux de thèse de Maëlle Vergnaud, soutenue en 2020. L'intégration des colmatages dans la quantification des incertitudes de production est une nécessité. De plus, il serait intéressant de tester la robustesse de la réduction de scénarios à des variations importantes de flux hydriques aux puits.

11.2.2 Gestion des dépendances et des interactions inter-blocs

Les travaux présentés supposent l'indépendance des blocs les uns avec les autres à plusieurs niveaux. Tout d'abord, les simulations proxys supposent qu'il n'y a pas d'échanges de traceurs dissous entre les blocs au cours de leur exploitation. Cette hypothèse est vraie dans le cas de blocs géographiquement éloignés, mais devient discutable dans le cas de blocs adjacents. La zone lixiviée par le fluide injecté d'un bloc est plus étendue que la limite de ses puits. Ainsi, un bloc peut lixivier le traceur du bloc voisin. On retrouve cette même interdépendance des blocs au moment des simulations ISR-U. Le meilleur moyen de prendre en compte cette dépendance est de simuler la lixiviation de tous les blocs de production d'une zone minière au cours d'une même simulation. La séquence d'ouverture et de fermeture des blocs étant choisie par l'utilisateur. La réduction de scénarios permettrait ensuite de sélectionner un petit nombre de réalisations englobant tous les blocs d'une même zone. Cela permettrait de sélectionner les réalisations échantillonnant la variabilité de chaque bloc et de prendre en compte les interactions entre les blocs, tout en conservant la cohérence géostatistique de la répartition spatiale des propriétés sur l'ensemble des blocs. Ces dépendances n'ont pas été étudiées au cours de la thèse en raison des limites en terme de capacité de calcul disponible. Une étude interne à Orano Mining tend à montrer que la somme des productions simulées indépendamment et la somme des productions obtenues en une seule simulation sont similaires [Dubille-Auchère, 2020].

11.2.3 Amélioration de la méthodologie de construction des réalisations

Le réalisme et la qualité de l'incertitude représentée par les courbes de production d'uranium dépendent fortement de la modélisation géostatistique de la répartition spatiale des propriétés du gisement. La méthode actuelle modélise indépendamment les trois propriétés OMR, Lithologie et

teneurs, avec juste la troncature de la teneur pour la construction des réalisations. Or, il est admis, d'après notre compréhension de la formation du gisement, que la répartition d'une propriété dépend de la répartition des autres. Il serait donc pertinent de concevoir une méthodologie de géomodélisation prenant ces liens en compte. Une méthode proposée serait d'utiliser des co-simulations de la variable catégorielle du facies géochimique et de la variable continue teneur en uranium, [Emery and Silva, 2009]. Une autre proposition serait d'utiliser des modèles stochastiques basés sur les processus génétiques du gisement pour modéliser le lithotype. Un exemple de tels modèles est Flumy, qui génère des réservoirs fluviatiles méandriformes [Lopez et al., 2009]. Les propriétés des gisements ont une répartition non-stationnaire. Ainsi, l'utilisation des modèles non-stationnaires générés par SPDE permettrait une modélisation globale du gisement ainsi que sa simulation, [Pereira, 2019].

Les contraintes en temps de calcul des simulations ISR-U ne nous ont permis de ne travailler que sur 100 réalisations pour chacun des blocs. Il s'agit d'une quantité d'exemples faible pour représenter la variabilité de la répartition spatiale des propriétés. Il serait particulièrement pertinent d'en augmenter le nombre, par exemple en recombinant les simulations du lithotype avec les simulations du faciès géochimique et les simulations du champ de teneur. Il y a cependant un risque de créer un biais dans la représentation de l'incertitude en utilisant la même simulation de propriété dans plusieurs réalisations. Une autre manière serait serait de simuler un plus grand nombre de simulations de chacune des trois propriétés. L'accélération des simulations de transport réactif, notamment grâce aux méta-modèles permettra de gérer ce plus grand nombre de réalisations.

11.3 Conseils à l'exploitant

L'objectif de la modélisation géologique est d'obtenir une représentation de la géologie du gisement qui va servir de base à différents calculs comme ceux de la réserve ou de la production. Les sources d'incertitudes sont nombreuses et impactent la répartition spatiale des propriétés du gisement. Les travaux de simulations de l'exploitation de la thèse montrent notamment l'importance de l'incertitude aléatoire sur la récupération de l'uranium. Cela souligne l'intérêt de représenter les gisements à l'aide de simulations stochastiques, et non pas à l'aide de modélisations déterministes. La compréhension de cette incertitude et sa répercussion dans les simulations de transport réactif permet de mieux concevoir la variabilité de la chimie des fluides produits.

Vis-à-vis du support de discrétisation des simulations géostatistiques, il peut sembler intéressant d'utiliser des mailles plus larges. Pour un même volume, cela réduit ainsi le nombre de mailles de la grille, et permettrait ainsi d'accélérer les simulations de transport réactif. Cependant, l'augmentation de la taille des mailles par rapport à la densité de puits et à la présence de lentilles argileuses semble parfois complexifier la résolution de l'écoulement, du transport et de la chimie par les codes de transport réactif de certaines réalisations. Ce phénomène est visible sur les résultats de simulation proxy de PB02 dans le chapitre 8. Il est ainsi recommandé d'étudier l'impact de la modification des résultats et du temps de calcul des simulations de transport réactif par rapport à différentes discrétisations de grille.

Les objectifs des proxys utilisés dans la réduction de scénarios sont d'être à la fois rapides à calculer et de permettre la sélection efficace des réalisations pour reproduire fidèlement les courbes de quantification d'incertitude P_{10}, P_{50} et p_{90}. Ainsi, les travaux réalisés au cours de la thèse ont permis de mettre en place deux types de proxys ayant chacun un compromis différent entre la précision et la rapidité de calcul. Les proxys statiques sont extrêmement rapide à calculer. Et s'ils peinent à reproduire fidèlement les courbes de quantification d'incertitude P_{10}, P_{50} et P_{90}, ils permettent tout de même d'avoir une approximation au premier ordre de la gamme d'incertitude de production des réalisations. Afin d'obtenir une bonne reproduction de la dissimilarité, et *in fine* d'obtenir une bonne approximation de la quantification d'incertitude, il est difficile de négliger le phénomène de dissolution. Le proxy basé sur la dissolution et la récupération d'un traceur minéral cinétique présente une bonne précision de reproduction de la quantification de l'incertitude de référence, mais son temps de calcul est non négligeable. Afin de le réduire, les résultats du chapitre 8 indiquent que les simulations proxys cinétiques réduites aux deux tiers du temps des simulations ISR-U restent

efficaces pour approximer la dissimilarité des réalisations. Il s'agit d'un gain de temps de calcul conséquent.

On a vu que le proxy basé sur la lixiviation du minéral traceur approxime raisonnablement la variabilité de la production en uranium. Ainsi, en observant la variabilité de production des réalisations non plus à l'échelle du bloc, mais à l'échelle de la cellule de production, on pourra identifier celles ayant la production la plus incertaine. Leur identification va permettre de cibler les zones prioritaires dans lesquelles effectuer d'éventuels forages supplémentaires dans le but de diminuer cette incertitude.

Quatrième partie

Annexe

Annexe A

Article accepté pour publication dans Computational Geosciences

Uncertainty quantification for uranium production in mining exploitation by In Situ Recovery

J. Langanay, T. Romary, X. Freulon, V. Langlais, G. Petit, V. Lagneau

Submited: May 2020 / Accepted: November 2020

Acknowledgements This work was funded by the industrial chair "In Situ Recovery of uranium", a program supported by the French National Research Agency and Orano. The authors also wish to thank Katco, for fruitful discussions and access to years of operation data.

Abstract

Uranium In Situ Recovery (ISR) is based on the direct leaching of the uranium ore in the deposit by a mining solution. Fluid flow and geochemical reaction in the reservoir are difficult to predict due to geological, petrophysical and geochemical uncertainties. The reactive transport simulation code used to model ISR is very sensitive to the spatial distribution of physical and chemical properties of the deposit. Stochastic geostatistical models are used to represent the uncertainty on the spatial distribution of geological properties. The direct propagation of geological uncertainties by multiple ISR mining simulations is intractable in an industrial context. The CPU time needed to perform one ISR numerical simulation is too heavy. This work presents a way to propagate geological uncertainties into uranium production uncertainties at a reduced computational cost, thanks to a scenario reduction method. A subset of geostatistical simulations is built to approximate the variability of a larger set. The selection is obtained using a proxy of reactive transport simulation. The main contribution of this work is the development of the proxy, which is based on an artificial mineral exploitation that has common properties with uraninite. It allows the discrimination of geostatistical realizations in terms of potential uranium production. Then, the ISR simulation carried out with the selected geostatistical realizations gives a good approximation of the uranium production variability over the whole set of geostatistical simulations. This approximation is then used to quantify the uncertainties on the uranium production. The proposed approach is assessed on real case studies.

Keywords In Situ Recovery Uranium Spatial variability Uncertainty Reactive transport Scenario reduction

1 Introduction

In Situ Leaching (ISL), or In Situ Recovery (ISR), has become one of the main uranium exploitation technique in the world over the past few years. The total uranium mass extracted with this technique raised from 13% in 1997 to 46% in 2011 [19]. This technique is particularly suited for well confined deposits with a high permeability, such as Kazakhstan roll-front deposits. More precisely, ISR consists in injecting chemical solutions at injector wells to modify the oxydo-reduction conditions of the deposit. The redox state modification implies the valence modification of the insoluble ion U_{IV} into soluble U_{VI}. The solution is pumped out from the deposit at producer wells and the dissolved uranium is extracted from the solution in a processing plant. The mining solution is eventually re-acidified and re-injected in the deposit. Figure 1 illustrates the ISR process.

Reservoir property measurements are performed along exploration and exploitation drill holes and cores. However, no matter how densely the measurements are performed, data will still lack to exactly estimate the geological properties of the reservoir. Two types of uncertainty

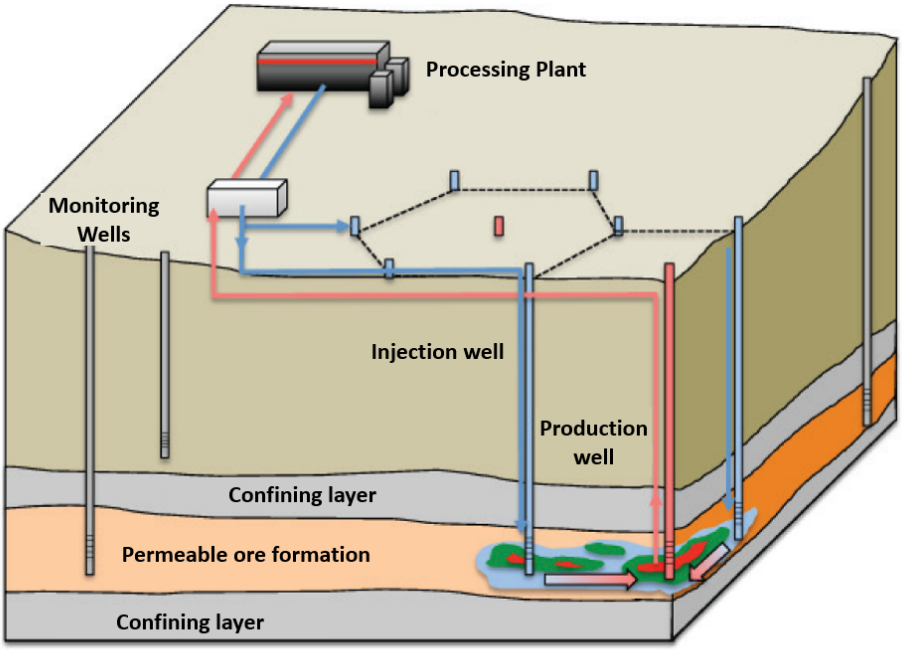

Figure 1. Schematic view of an ISR operation.

Figure 1: *Uranium ISR process scheme, from Lagneau et al [23]*

are commonly identified. As exposed Dowd [13], the epistemic uncertainty and the aleatory uncertainty should be distinguished. The epistemic uncertainty corresponds to the uncertainty related to the parameters of the stochastic model used, while the aleatory uncertainty is the inherent variability of a process or a phenomenon. In our case, epistemic uncertainty is the uncertainty on geostatistical model parameters (variograms, facies proportions, ...), while the aleatory uncertainty can be represented by the seed used to generate geostatistical realizations. This paper focus on the aleatory variability of the geology, while the epistemic uncertainty that the parameter variability, is deemed constant in the proposed methodology. Once the geological uncertainty has been assessed and modeled, the exploitation process has to be simulated, applying a transfer function to the geostatistical representation of the geology (i.e. stochastic simulations). In ISR mining, this transfer function can be a process-based reactive transport code. In this work, we use HYTEC, a reactive transport code developed in the Centre of Geosciences, Mines ParisTech [40].

Reactive transport codes couple and simulate flow, element transport and chemical speciations in porous media. ISR modelling with reactive transport codes interests were demonstrated [23]. Simulating the physico-chemical processes involved in ISR mining with reactive transport simulations and fitting their results with available data can help decision making, find optimization schemes, quantify exploitation behaviour or predict the production [24]. Another use of ISR numerical modelling with reactive transport simulation is the improvement of the understanding of the geochemical behaviour of the deposit exploitation [27]. Indeed reactive transport simulations are strongly linked with the geology of the deposit.

The impact of spatial variability of the geological properties on flow and transport have been studied in the oil industry and gas storage (ex : [14, 21, 1]). More recently, similar studies have been performed in the reactive transport domain. The results of De Lucia *et al* [10] show the influence of a heterogeneous spatial distribution of the geological properties of a medium on the evolution and the outcome of reactive transport simulations as can be seen in figure 2. Due to their deposit process, roll-front deposits have strongly heterogeneous properties, not only the physical properties that constrain flow and transport, but also the mineral grades spatial distribution which control chemical reactant consumption and metal dissolution.

The intrinsic geological uncertainty can be represented by a large number of realizations of the geostatistical model obtained by stochastic simulation. The direct propagation of this in-

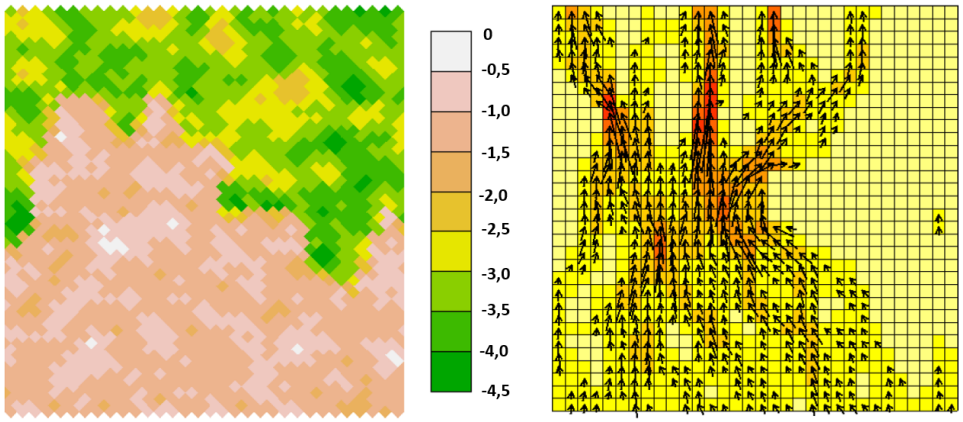

Figure 2: *Example of the impact of the heterogeneous spatial distribution of permeability on fluid flow. The fluid flow controls the transport of chemical elements, and thus the transport of reactant. Chemical reactions in the systems are influenced by the heterogeneities [10]. Left: permeability field in decimal log scale, Right: resulting flow field*

situ geological uncertainty into uranium production uncertainty is not possible in an industrial context due to the CPU time needed. A single parallelized reactive transport simulation of ISR exploitation amounts to more than a day on 16 to 24 CPUs for a unique realization of the geostatistical model.

The purpose of this work is to find a way to propagate the geological uncertainties into uranium production uncertainties at a reasonable computational cost. This terms to restrict ourselves to perform only a limited number of reactive transport simulations to model the ISR. The developed solution relies on the scenario reduction approach introduced by Scheidt and Caers [34]. Several successful application cases of scenario reduction can be found in the literature, particularly in oil and gas extraction ([3, 30, 5]) or in CO_2 storage [7]. This approach is based on the selection of a subset of geostatistical simulations among a large set to approximate the variability of the whole set. The selection relies on an easy to compute and efficient description of each simulation. The description allows the discrimination of the geostatistical simulations in terms of potential uranium production. This description step is critical. It needs both to be fast to compute and to represent accurately the uranium production. The main contribution of the paper is the development of an artificial mineral tracer of uranium in the reactive transport simulation to describe the geostatistical simulations. The fast simulated recovery of this artificial mineral approximates well the uranium recovery. Once the description has been carried out, the selection of a subset of geostatistical realizations is performed to sample the uranium production variability of the whole set. Each selected realization represents a subset of the whole set of realizations and is weighted accordingly. Finally, the ISR is simulated with the selected geostatistical realizations. The weighted outcomes give an approximation of the uranium production variability corresponding to the whole set of geostatistical simulations. This approximation is used to quantify the uncertainty of the uranium production in a manageable computational time.

The paper is organized as follows. In the first part, the geological and geostatistical modellings of the deposit and ISR modelling are introduced. In the second part, the proposed methodology to quantify uranium production uncertainty is presented. The third part presents two application cases on real Kazakhstan production areas at the Katco mine. The parameters of the methodology are set on a first case while the approach is validated on a second case. The last part of the paper discusses our results and opens perspectives for the uranium mining industry.

2 In Situ Recovery modelling of a uranium roll front deposit

2.1 3D geological modelling of a uranium roll front deposit

ISR can be used in highly permeable and confined deposits, such as uranium roll front deposits. These deposits are created by uraninite and coffinite accumulation localised in a confined aquifer between two impermeable layers of shale. This roll front accumulation is due to aquifer flow and different oxidation state zones. The uranium accumulation occurs at the interface between an oxidized upstream zone and a reduced downstream zone of the aquifer. Indeed, soluble complexes of uranium ion of valence VI precipitates into coffinite or uraninite when it is reduced into uranium IV [6]. The ISR technique is based on the inverse reaction. The spatial distribution of three oxydo-reduction lithofacies (oxydized barren, uranium ore rocks and reduced barren) is a critical point in uranium ISR modelling as it will constrain uranium production. Figure 3 schematizes a roll-front deposit.

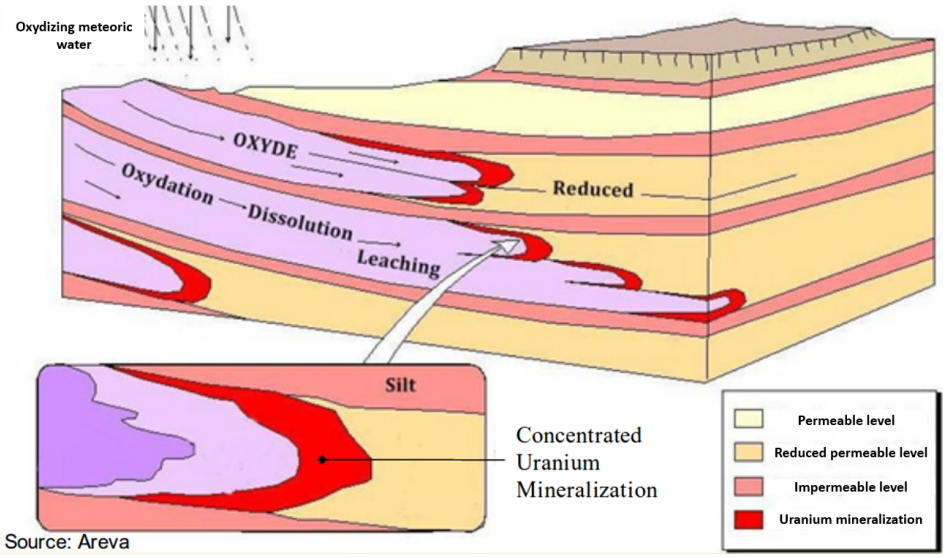

Figure 3: *Roll-front uranium deposit scheme, from Fontaine et al [15]*

The roll-front deposits considered in this paper are located in Kazakhstan. They are exploited by Katco, a joint venture between Orano and Kazatomprom. They are formed in the geological formations of Ikansk and Uyuk. These formations are thirty to fifty meters thick and between three hundred and four hundred fifty meters deep. Another particularity of roll front deposits is the heterogeneity of their geological properties. The permeability heterogeneity of the aquifer comes from the sedimentological history of the deposits which led to heterogeneous shale/sand distributions. Spatial distributions of the two other properties (oxydo-reduction lithofacies and uranium grade) are a consequence of the aquifer flow (the permeability heterogeneity) and of reducer material burying during the deposit genesis [6]. The 3D geological modelling of the spatial heterogeneities and associated uncertainties is hence a challenge, especially from a limited amount of data. It is however necessary for decision making in exploration, planification and operation and required as an input to the ISR simulation code.

2.2 3D geostatistical modelling

Once the geological model of the deposit is determined by the geologist, a 3D numerical geological property grid can be built to perform ISR simulations. Three geological properties are required as an input: the permeable/impermeable lithotype distribution, the Oxidized-Mineralized-Reduced (OMR) facies distribution, and the uranium grade distribution.

The three properties are only known along 1-dimensional drill holes scattered over the deposit. Between the drill holes, the three properties values have to be generated at each grid node to

serve as an input to the reactive transport code. The generated values have to be representative of the spatial heterogeneity and variability. This is made possible with geostatistical models. The geostatistical modelling workflow is detailed in Petit *et al* [29]. In our case, two data sets from different drilling campaigns are available to infer the geostatistical models. The first available set comes from exploration and development drill holes. Exploration and development campaigns aim at characterizing the ore deposit (100 meters by 50 meters spacing) and allow designing the exploitation blocks. The second set comes from exploitation wells drilling dedicated to injection and production of the mining solution (40 meters by 40 meters spacing). In this study, we limit our work to geostatistical models constrained by exploration and development data. Constraining the geostatistical model to the production wells is interesting to reduce the geological uncertainties. The methodology presented in this paper can be applied to geological realization constrained to technological drill holes. However, it is more efficient to perform this methodology at the exploration and development step where the geological uncertainty impact is bigger than at the exploitation step.

Oxydized-Mineralized-Reduced lithofacies
A truncated Gaussian model [2] is fitted to model the OMR lithofacies. It is geologically relevant to choose such a model because uranium precipitates at the oxydo-reduction state modification, thus forming three contiguous facies. Using well information, vertical proportion curves (VPC) of the three OMR lithofacies described above are computed according to a regular polygon pattern on the study area. The 3D interpolation of the VPC is performed by 2D kriging on the horizontal plan. Then the variogram model of the underlying gaussian function is fitted and used to simulate a large number of geostatistical simulations. The conditioning of the simulations to well data is performed using Gibbs sampling [18, 16].

Lithotype
The second categorical property is the lithotype: shale, sand and coarse sand. This property is significant due to the ISR mining technique, because only the uranium in permeable rocks can be leached. Indeed, it governs the flow of the leaching solution in the reservoir. Similarly as the OMR facies, the lithotype is simulated using a truncated Gaussian model. It is inferred in the same manner as for the OMR facies. The vertical proportion curves are computed using drill holes data, then interpolated by kriging.

Uranium grades
Finally, uranium grades are generated within the mineralized lithofacies. First, the continuous data along drill holes are regularized to 1 meter length. Second, an anamorphosis model is used to transform this grade distribution to a Gaussian grade distribution [8]. The transformed gaussian field is simulated using direct block simulation, as presented by Deraisme *et al* [12]. Finally, the simulated gaussian field is back transformed as a uranium grade field.

The three properties are simulated independently and a post treatment is performed to improve the geological consistency. According to the uranium deposit creation mechanism, mineralized facies cannot be found in non permeable rock. So each voxel of the grid {Shale, Mineralized} is set to {Shale, Reduced}.

Figure 4 shows the same vertical cross section for three different realizations. We can observe the spatial variability of the properties. There are no differences between realizations along the well data due to the conditioning, but differences can be noticed in the spatial distribution of the OMR facies between the three realizations. The spatial variability of the property distributions between the wells represents the uncertainty. A large number of 3D realizations have to be generated to represent properly this uncertainty.

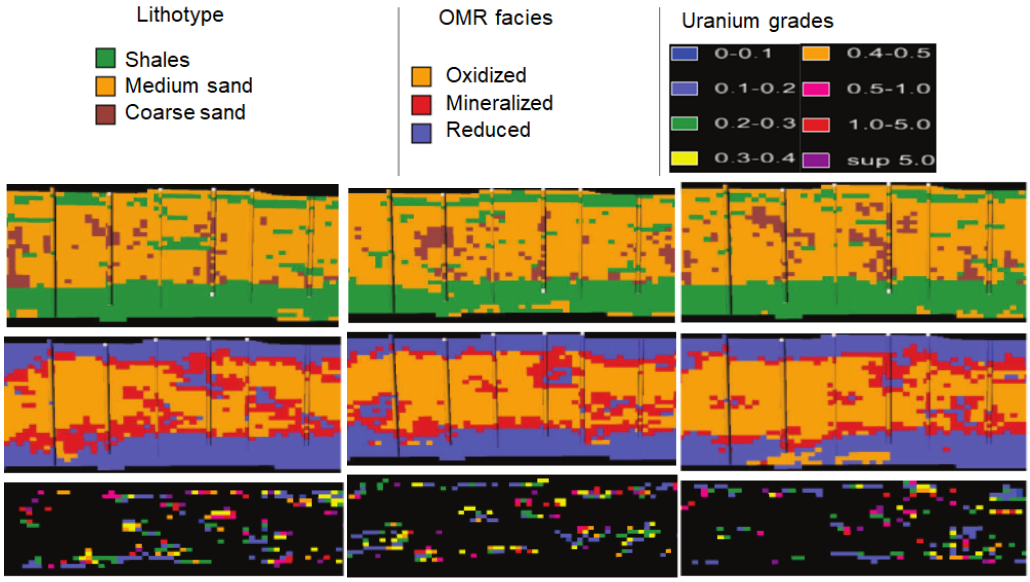

Figure 4: *Same vertical cross section of three differents realizations for the three properties: lithotype, OMR facies, and uranium grade distribution [17]. They are identical along drill holes. It is a transverse cross section of the deposit. Undefined uranium grades are black*

2.3 ISR modelling by reactive transport simulation with HYTEC

During the whole duration of the deposit exploitation, the mining operator has data from drill holes only and from the mining solution analysis at the producer wells. The solution at producer wells is a mixture of fluids coming from a porous medium with a strongly heterogeneous chemistry. Reactive transport simulation can help complement these operational data with a quantitative estimation of the behavior of the ore body: e.g. fluid migration, local pH, local uranium recovery, identification of poorly acidified zones or weakly reactive uranium areas [23].

ISR simulation is performed with the reactive transport simulation software HYTEC. The HYTEC software is based on a sequential iterative algorithm, relying on finite volume discretization [40]. This code combines transport in porous media with the geochemical reaction resolution module CHESS [26]. The HYTEC functioning scheme is presented in picture 5.

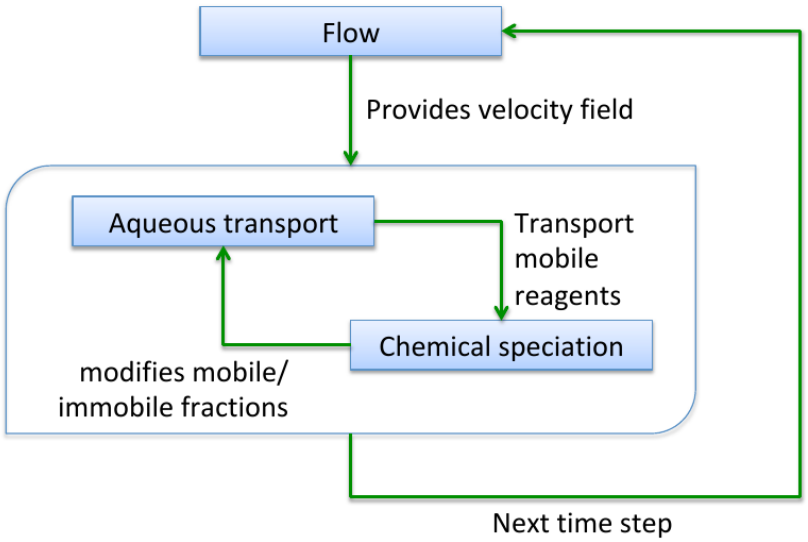

Figure 5: *Reactive transport simulation software HYTEC functioning scheme [24]. This is the simplified diagram of actions within one time step*

Among possible uses of HYTEC [11], its application to model uranium leaching during the ISR exploitation makes it a powerful tool to plan and manage the uranium ore exploitation [23].

The computational cost of reactive transport simulations is important. The scale of study is the production block. A production well in the center of a hexagon of injection wells constitutes a production cell. The distance between the wells is around forty meters. A group of a dozen production cells constitutes a production block, as pictured in figure 6. Despite the constant improvement of computers, and reactive transport algorithms, ISR modelling at this scale can still be counted in days. Indeed we are working on hundreds of thousand voxels in the discretized grid, over several years, with a complex geochemical model.

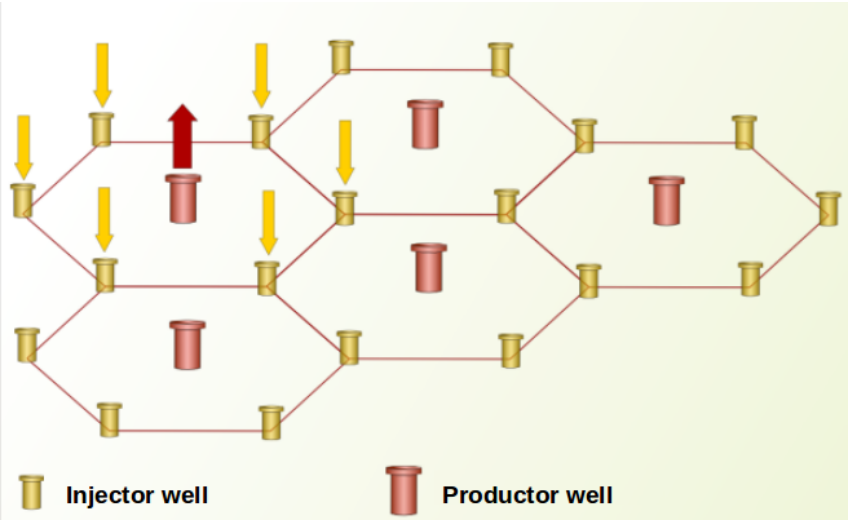

Figure 6: *Well field mesh scheme with injectors and producers of a production block. A typical production cell is a hexagon of injector wells with a producer in the center of the cell. A production block is a group of a dozen production cells*

A reactive transport simulation of ISR mining needs three different types of input parameters [31]. The first one is the 3D geological model. It contains the 3 geological properties needed for the simulation and has been described thoroughly above. The second type of data are the mining operational parameters: the well field geometry, the injected fluid chemical composition, the injected flowrate, and the produced flowrate. The third type of input parameter is the geochemical model, which contains the thermodynamic and geochemical database needed to solve the chemical speciation during the simulation. The geochemical parameters used in this work were first assessed by Ben Simon *et al* [38], and are similar to those used by Lagneau *et al* [23].

For the sake of clarity, from now on, a *realization* will designate a simulated triplet of a geostatistical simulation of the three geological properties, generated conditionally to the data, while a *simulation* refers to a reactive transport numerical simulation.

3 Scenario reduction method in ISR exploitation

3.1 Goal and interest of the scenario reduction method

The usefulness of ISR modelling by reactive transport simulation through HYTEC is mitigated by the associated computational cost. This makes it impractical to use HYTEC in an operational mining context to directly propagate the geological variability to the uranium production, by simulating the leaching process in a large number of realizations. Our purpose is to select a few realizations in the whole available set under two antagonist constraints: minimizing the number of ISR simulations to perform while keeping a low approximation error between the uranium recovery variability of the selected realizations subset and that of the whole set. The choice of

the number k of selected realizations in the initial set of N realizations is determined by the balance between these two constraints.

The method was first introduced Scheidt and Caers [34] and was largely spread in different geosciences contexts, such as oil & gas industry [3, 37, 30], hydrogeology [20] or CO_2 storage [7].

The geological realization reduction algorithm developed thereafter is divided in three steps:

1. **Description**
   On each conditional realization is applied one or more description function (proxy). The description functions aim to approximate ISR modelling results by reactive transport simulation. Computing the uranium reserve or performing tracer simulation are two example of proxies. For instance, they can be static measures of the geological properties or a fast tracer recovery simulation, as described below. The idea is to form a proxy of the exploitation simulation that is easy and fast to compute. Then, the results of these proxies are used to get few scalar descriptors. These descriptors are used to discriminate the realizations between each others in terms of the uranium production.

2. **Dissimilarity matrix**
   The descriptor vector of each realization can be seen as coordinates of the realization in the descriptors space. Because descriptors are built and selected to be related to the uranium production, the dissimilarity between each pair of realizations in the descriptors space correlates with the difference in uranium production between them.

3. **Selection and weighting**
   Once computed the dissimilarity matrix between each realization, the clustering algorithm of the k-medoids is applied [5]. It segregates the realizations into clusters, selecting in each cluster the realization closest to the barycenter of the cluster, and weights each of the k selected realizations with the proportion of realizations belonging to its cluster.

Once k realizations are selected and weighted, the ISR simulation is run to predict the uranium production in each realization. The k weighted outcomes provide an approximation of the uranium production distribution. Hence, they can be used to quantify the uncertainties, for instance to compute P_{10}, P_{50} and P_{90} production curves. The median production curve and the associated error are to be taken into account during decision making about mining operations and planification. For instance, if the uncertainty is deemed too large, additional conditioning data should be gathered.

3.2 Geostatistical realization description using an ISR recovery proxy

3.2.1 Discrimination of realizations in terms of uranium production: uranium leaching proxy building

The reduction scenario is based on the capacity to quickly and efficiently approximate the uranium production of each realization to discriminate them. Considering the computational cost of reactive transport simulation of uranium ISR, we choose to build a proxy of it. The final proxy is built by trial and error starting from very simple proxies to more complex ones until the results where satisfying and validated.

The simplest proxy to describe a realization is a static one. Static reservoir proxies for geostatistical realizations comparison have been studied in several works (see *e.g.* [32, 4]). Reservoir connectivity or Gross rock volume are two examples in oil & gas. In our case, adapted static proxies have been tested (uranium reserves, mineralized volume, ...). But quality tests and reproductibility tests on an other case have shown that static proxies does not yield satisfactory results. The static proxies that we have tested are not able to describe a physical system controlled by flow, transport and chemical reactions. In fact these descriptors cannot account for phenomena such as rich uranium dissolved fluid losses, or will take into account uranium nuggets unreachable to the mining solution. The conclusion is that it is not possible to neglect the dynamic behaviour of the reservoir to predict the uranium production.

Solutions have been proposed in the literature to incorporate a dynamical description of the realizations, and thus to allow us to avoid limitations that static proxies can have. The use of streamline-based proxies is one of the most acknowledged method. Streamline simulations can be used to discriminate realizations in a scenario reduction context [35, 30, 37]. However, streamline based simulations may neglect the dispersion and the mixing of the solution inside the reservoir that are essential in ISR simulation. These processes strongly influence reactant consumption in the reservoir, dissolution efficiency by mixing of strongly reactive solution, and the solution composition at producer wells and cannot be reproduced accurately along streamlines. The dispersion and the mixing of the solution can be simulated by reactive transport codes such as HYTEC. This is the reason why we choose to keep a reactive transport simulation as a proxy of ISR simulations. Upscaling could also have been considered, as some works on permeability to accelerate reactive transport simulation have been proposed in the literature, see e.g. [28]. However, the upscaling of a heterogeneous mineralogy at the reservoir scale is still an open problem. Plus, it is hard for upscaling methods to deal with this well field density. To simplify and fasten the computations, we choose to build a geochemical system proxy instead of a reactive transport proxy.

3.2.2 Uranium leaching proxy: synthesis of the geochemical system with a unique soluble mineral

The dynamic description chosen to discriminate realizations in terms of reactive transport outcome is a "mineral tracer of uraninite". The most CPU time consuming part in reactive transport is the chemical speciation. It is resolved several times at each time-step for each voxel of the grid. This CPU consumption increases drastically with the number of considered chemical species. With the proposed tracer, the chemical system of the reactive transport is reduced to a unique mineral element (the solid form of the tracer) and a unique soluble element (the soluble form of the tracer). All other chemical elements are excluded from the simulation. ISR exploitation simulation parameters other than chemistry are preserved (wellfield geometry, well fluid flow, permeability field, ...). To ensure the robustness of the uranium tracer, we ensure the following properties : the grade distribution over the grid is the same as uraninite at the initial state; the kinetic constant of its dissolution reaction is equal to the uraninite dissolution kinetic constant at a pH equal to 1.8, that is the average reservoir pH during ISR exploitation; its equilibrium constant is computed as the maximum uraninite concentration reached in a full reactive transport simulation. The last point is a necessary property to assess the reactant consumption in the reservoir. Note that the saturation state is involved in the dissolution reaction. Its chemistry can be synthesized as equation 1, 2 and 3. Note that the kinetic rate depends on a kinetic constant, a reactive surface S, and the distance to the equilibrium state.

$$Tracer_{(sol)} \iff Tracer_{(aq)} \tag{1}$$

$$LogK_{Tracer} = Log(1/Tracer_{(aq)}) = 3.2 \tag{2}$$

$$\frac{d[Tracer_{(aq)}]}{dt} = -6.9 \times 10^{-9} \times S \times (1 - \frac{Q}{K}) \tag{3}$$

The two graphs in figure 7 compare the daily concentration of uranium and the tracer produced in the same realization at production block scale during 1550 days. Some differences are noticeable. The first one is the instant dissolution and production of the tracer. In the full ISR exploitation simulation, there is a preliminary dissolution phase of the gangue (such as calcite) minerals before before pH drops and uraninite can start dissolving. Another important point is the very smooth aspect of the tracer production compared to uranium production.

From the tracer production curve of each realization, several descriptors are computed for each realization. The idea of the description phase is to compute descriptors from the proxy

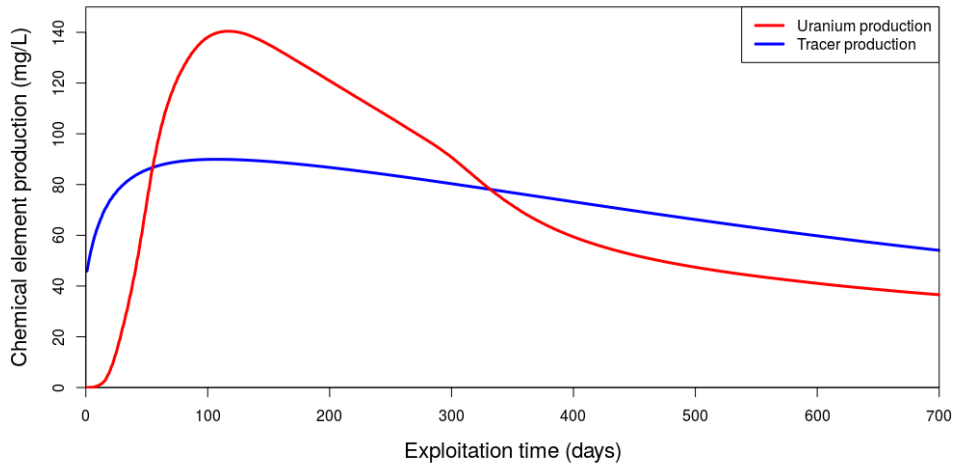

Figure 7: *Comparison of daily uranium and tracer production. The blue curve is the tracer production in a realization during 700 days, and the red one is the ISR uranium production in the same realization*

response such that the resulting distance between realizations is highly correlated to the production response. The choice to extract descriptors from the curves was guided by operator experiences, needs and habits. Discussions highlights that four descriptors of uranium production are commonly used by miners: maximum of daily uranium production, date of the maximum daily uranium production, daily uranium production at the end of the simulation, and total mass of uranium produced at the end of the simulation. We considered the four tracer production descriptors equivalent to their uranium production counterpart. Different tracer descriptor combinations were tested and showed that the maximum daily production date could be discarded. The retained combination is the descriptors triplet : *1)* maximum of daily tracer production, *2)* daily tracer production at the end of the tracer simulation, and *3)* cumulative tracer production at the end of the simulation. Each one has an important impact on operation management. The cumulative production is essential to decide how to reach the annual uranium production target. The final daily uranium concentration is needed to determine the closing date of the production block. The maximum daily uranium production is needed to manage the produced fluid treatment plant. The objective of this description by tracer production is to fasten and approximately assess the differences of uranium production between the realizations. Two realizations with different tracer productions will be likely to have different uranium productions. We will see in the two application cases that these three descriptors are adequate to discriminate the realization set for the corresponding uranium descriptors.

3.3 Realization dissimilarity matrix and multidimensional scaling

Once the mineral tracer exploitation is simulated, each realization i is described as a vector X^i of descriptors. The dissimilarity between the coordinates of the realizations in the descriptors space is a dissimilarity of mineral tracer production and thus an approximation of the dissimilarity in uranium production. To quantify the dissimilarity between realizations, the Euclidean distance is computed for each pair of realizations, as proposed in [34]. We have chosen to give the same weight to each descriptor. Discussions with mining operators show that the descriptors used are approximately equally important. The choice is thus guided by industrial concerns. Descriptors are scaled and centered to not artificially increase the weight of descriptors that have a higher value.

Consequently the distance D_{ij} between two realizations i and j computed on p descriptors

is:

$$D_{ij} = \sqrt{\sum_{k=1}^{p} (X_k^i - X_k^j)^2} \tag{4}$$

Next, multidimensional scaling (MDS) is applied to the dissimilarity matrix. MDS is a class of tools used to work in the space of study of objects from their dissimilarity matrix. MDS is also used to help the visualization of these objects [9]. The visualization is the main reason why MDS is used here. Based on the singular value decomposition of the dissimilarity matrix, classical MDS of Euclidean distance dissimilarity matrix is equivalent to Principal component analysis. We apply MDS on the descriptor space to project the realizations in a reduced space synthesizing descriptor data. It allows to decrease the problem complexity, to visualize the realizations in a 2D representation. With this particular descriptor set, we use it mostly to visualize our data. The distance in the reduced space is used to perform the clustering.

3.4 Clustering and selection

To select a subset of k realizations in the whole set, a clustering algorithm is applied in the reduced descriptor space. For each k cluster, a representative realization is selected as the nearest realization to the barycenter of the cluster.

While Scheidt and Caers [34] and others chose to use the k-means algorithm, we decide to use instead the k-medoids clustering algorithm [22]. The difference is in the convergence condition during the iterations. While k-means minimizes the distance between the barycenter of a cluster and its realizations, the k-medoids algorithm minimizes the distance between the nearest realization to the barycenter of the cluster and the realizations it contains. It is more sensible to consider particular realizations rather than an abstract barycenter. The algorithm is applied to the two first axes of the reduced descriptor space. The proportion of realizations in each cluster gives a weight to each representative realization.

The scatter plot in figure 8 pictures the k-medoids result on a realization set projected on a 2D reduced space. The chosen number k of clusters is determined using the average silhouette indicator [33]. The silhouette is a quantity that represents tightness and separation of clusters. It was developed to evaluate the quality of a clustering. Note that this indicator has to be balanced with the simulation time allowed to compute full reactive transport simulation.

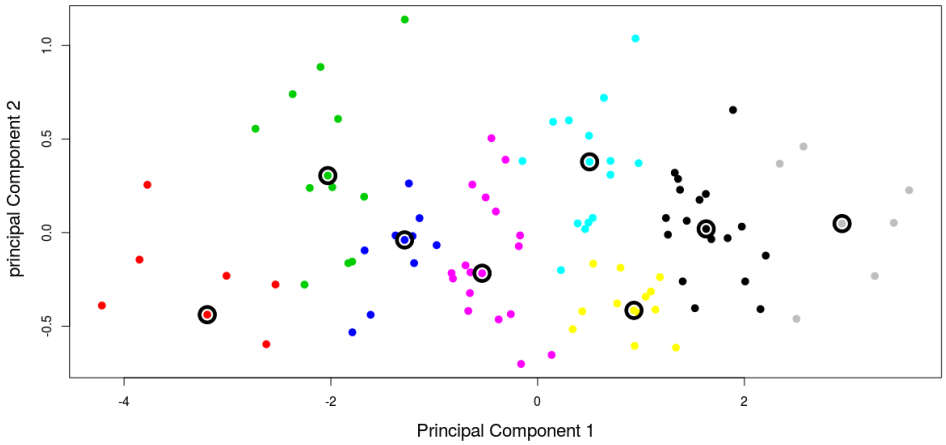

Figure 8: *k-medoids algorithm result in a realization set. In this scatter plot, each point represents a realization, each color a cluster attribution, and each circled realization, the realization of the cluster that is nearest to its barycenter. The scatter plot is represented on the plan defined by the first two principal components obtained by MDS*

3.5 Uncertainty quantification in uranium production

The scenario reduction is applied to a set of N conditioned geostatistical realizations. The above described proxy of the ISR simulation is applied to each realization to approximate its uranium production. Once carried out MDS and clustering, the reactive transport simulation of the ISR exploitation with the complete geochemical system is performed with the k selected realizations, with $k \ll N$. By the nature of the selection, the uranium production of the k realizations are efficiently sampled within the N realizations, and thus provide an accurate approximation of the uranium production variability of the whole realization set, as illustrated in the next section. The uranium production uncertainty approximated by the variability of the subset can be quantified by different manners using the selected realizations weights. In this work, we consider the selection of the decile production curves P_{10}, P_{50} and P_{90} using the weighted simulated uranium production curves. The uncertainty quantification is pictured in figure 9.

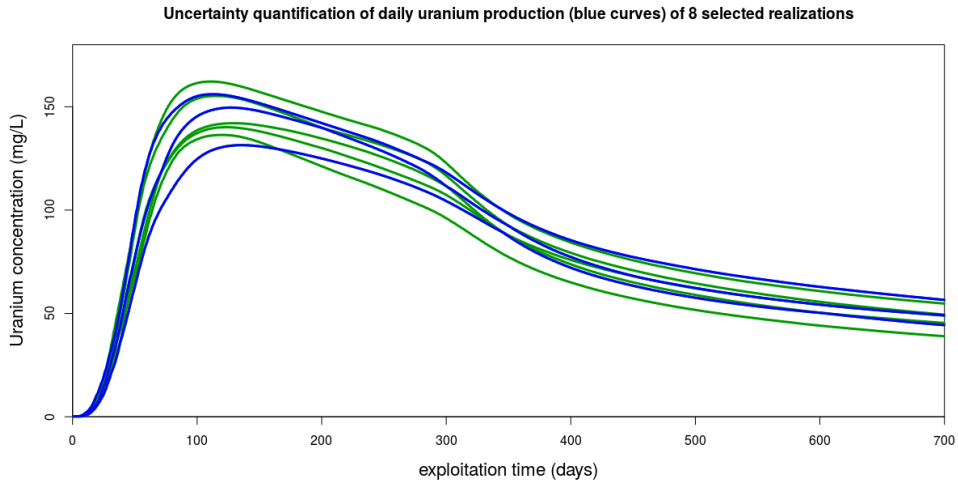

Figure 9: *Approximated uranium uncertainty quantification using scenario reduction. The uranium recovery variability of the whole realization set is sampled by eight realizations. Using the computed weight of each selected realization, the P_{10}, P_{50} and P_{90} curves (blue) are selected to quantify the uncertainty*

4 Real case studies, parameterization and validation

In this section, we apply the scenario reduction method described above to set the descriptor combination and the number of selected realization on a first production block (PB01). The scenario reduction is applied to a set of 100 realizations of PB01. The descriptor combination is determined by trial and error. Then, the approximated UQ is compared to the uranium production uncertainty of the 100 realizations obtained by direct propagation.

A second scenario reduction is applied to a second production block (PB02) to assess the robustness of the method to a change in the geology, well field geometry and 3D grid discretization, using the same descriptor combination as for the first block. On PB02, the UQ computed with the scenario reduction method is also compared with the UQ of a direct propagation of the geological uncertainty to assess and validate the approach as well as its parameterization.

4.1 Parameterization of the uncertainty quantification

4.1.1 Production block description

The geology of the first production block has an important variability of its properties distributions. The mineralization is distributed irregularly on the whole reservoir thickness as shown on

three vertical cross section of the production block in figure 10. The well field geometry is composed of 41 injector wells and 11 producer wells. The input data set for the scenario reduction consists of 100 geostatistical realizations conditioned to the exploration and development drillholes. Geostatistical simulations are performed on a 5x5x1m 3D grid containing 295000 voxels. The global OMR facies proportions used are: Oxydized baren: 27.7%, Mineralization: 17.6%, Reduced baren: 54.7%. The impermeable shales of the reservoir are present with a lenticular shape. The global lithotype proportions are: Impermeable: 28.5%, Sand: 61.8%, Coarse Sand: 9.7%. Injection and production flows for mineral tracer recovery and uranium ISR exploitation are constant during the 700 days exploitation time. Considering these parameters, a single parallelized uranium ISR exploitation simulation on 16 to 24 CPU with HYTEC approximately lasts one day.

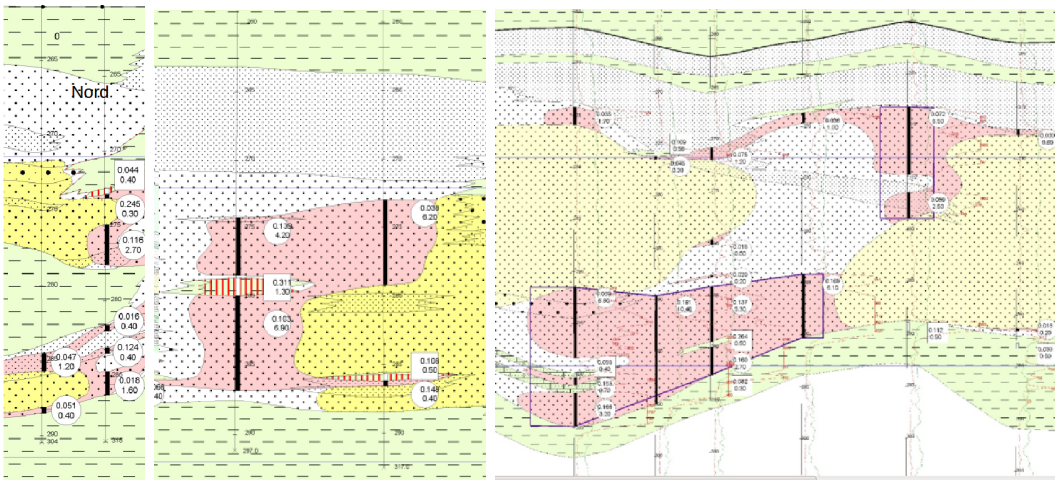

Figure 10: *Three parallel vertical cross section of PB01 showing lithotype and mineralization distribution. Green corresponds to impermeable shale rocks. Yellow and white are barren sandrocks. Red is uranium ore sandrocks*

4.1.2 Description of the realizations

For each realization, the geochemical system is reduced to a unique mineral tracer as described above. The exploitation of this mineral tracer is then simulated with HYTEC for the same duration (700 days) as the U production. Table 1 summarizes the time gain with the tracer instead of the full ISR simulation on the realization set. The global gain is a factor 5 to 6.5, which allows us to use the proxy in a reasonable time.

	Min (h)	Median (h)	Mean (h)	Max (h)
PB01 - tracer simulations	1.9	3	3.1	7.4
PB01 - ISR simulations	12.5	15	17.9	42.7

Table 1: *Simulation time comparison on PB01 between ISR simulations and tracer simulations*

The two graphs in figure 11 show the variability of the total tracer production and daily tracer production among the 100 realizations. There is more than 25% difference between the minimimun and maximum total tracer production. This tracer production response variability illustrates the impact of the geological uncertainty on uranium production. The quantities needed to describe each realization are extracted from the daily tracer production curve and from the cumulative tracer production curve. The three chosen descriptors are : the maximum daily tracer production, the daily tracer production at the end of the simulated exploitation, and the total tracer mass recovered during the exploitation. Table 2 shows the correlation between the description applied to the tracer simulations and the description applied to the uranium ISR

mining. Realization descriptor plot for tracer and uranium production show quite good linear structures with an $R^2 = 0.88$, as shown for the maximum daily production, picture 12. A high correlations between tracer descriptors and uranium descriptors (with an average of 0.91) underlines the relevance of the tracer description. The three descriptors computed on the tracer production seems to contain enough information to discriminate the realizations in terms of uranium production.

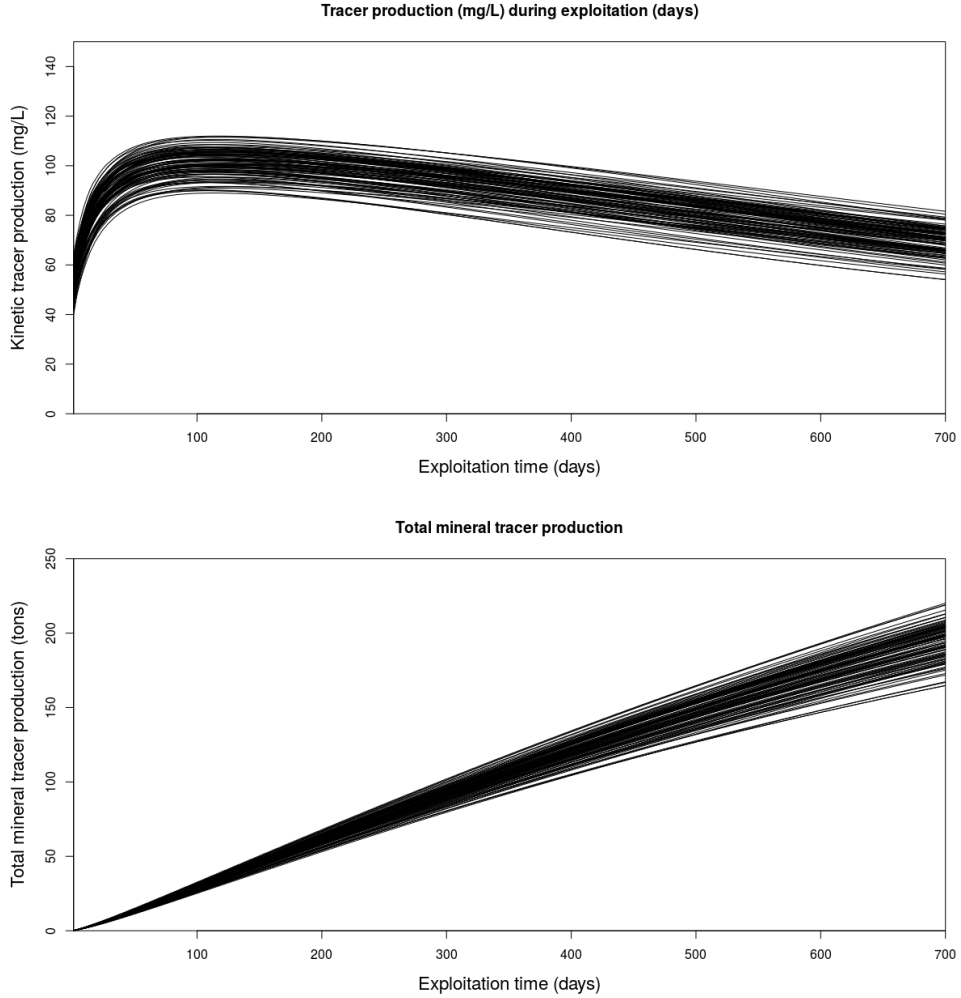

Figure 11: *Daily and cumulative mineral tracer production for 100 realizations on PB01*

Descriptors	correlation between tracer and uranium production
maximum daily production	0.88
final daily production	0.88
total mass recovered	0.96

Table 2: *Correlation between tracer and uranium production, PB01*

4.1.3 Dissimilarity computation and realizations subset selection

The 100 realizations are represented in the 3D descriptors space. Multidimensional scaling is applied to decrease the space to 2D to help the visualization. The first two principal components contain more than 99% of the variance. The cumulative variance of the principal components is shown table 3. The Euclidean distance is then computed between each pair of realizations in the reduced space considering the first two components as coordinates. Finally, the selection of the subset of realizations is carried out using the k-medoids algorithm.

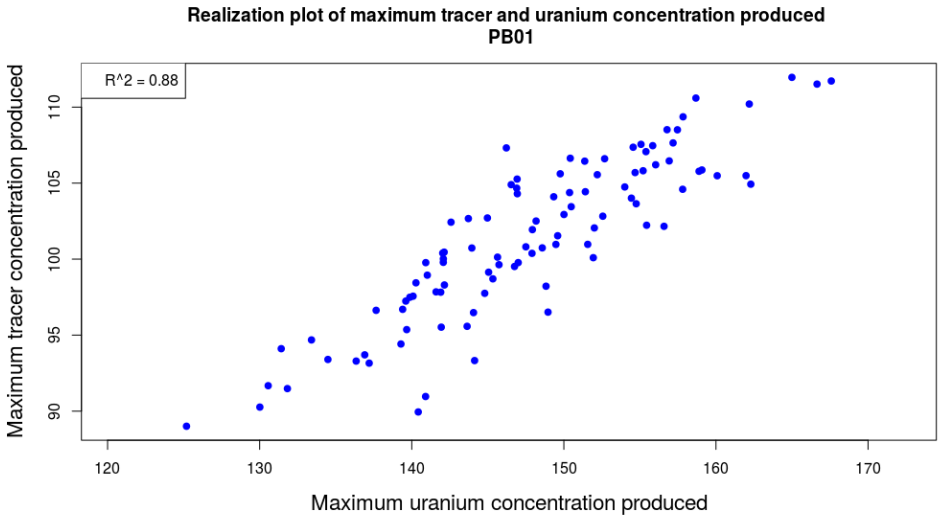

Figure 12: *Comparison between maximum daily tracer production and maximum daily uranium production for the 100 realizations - PB01*

	1^{st} component	2^{nd} component	3^{rd} component
Cumulative variance	94.9%	99.9%	100%

Table 3: *Cumulative variance explained by the principal components of the MDS on PB01*

A sensitivity study is performed to find the number of realizations required to minimize the number of ISR simulations, while keeping a low approximation error between the uranium recovery variability of the realizations subset and that of the whole set. To do so, the average silhouette of the clustering is computed for different values of k. Figure 13 shows the value of the silhouette as a function of the number of clusters. The higher the average silhouette, the better the choice of k. 7 clusters provides a good balance between the value of the silhouette and the number of selected realizations. Less clusters might be unstable and may not give a good selection among the realization set, while more clusters will be too time consuming with respect to the gain in precision when simulating the ISR exploitation.

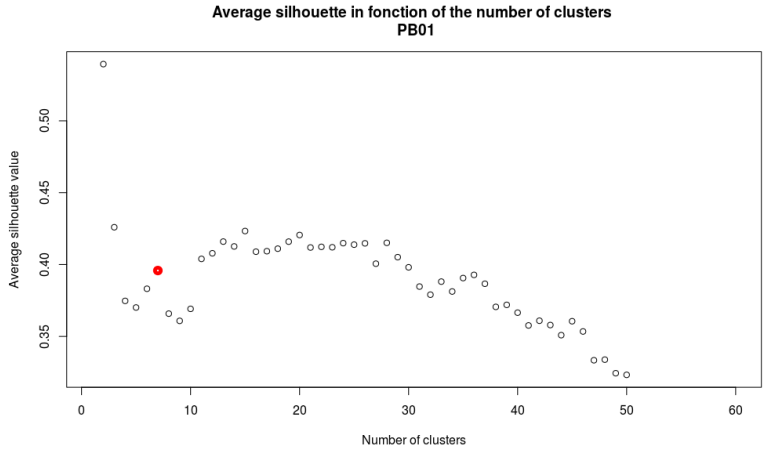

Figure 13: *Value of computed the average silhouette in PB01 as a function of the number of cluster. The chosen number of cluster to perform the scenario reduction regarding these values and the allowed computational time is 7 clusters*

The result of the k-medoids algorithm with 7 clusters on the hundred realizations of PB01 is

shown in figure 8.

4.1.4 Uncertainty quantification

Once seven realizations are selected by the scenario reduction, the uranium production is simulated in the 7 selected realizations using Hytec. The weighted uranium production curves of the selected realizations forms an approximation of the uranium production distribution. We can hence compute a median production curve as well as confidence bounds. To validate this uranium production uncertainty quantification, the direct propagation of the geological uncertainty into uranium production uncertainty is carried out. In other words, the uranium ISR exploitation is simulated in the whole set of 100 realizations as a reference to validate the selection of the realizations. It allows to compare the approximated uncertainty quantification (with 7 realizations) and the reference uncertainty quantification (with 100 realizations). This comparison can only be performed in a research context due to the computation time needed. The comparison is shown in figure 14. We can notice on the lower graph that the approximated and reference median are close, as well as the P_{10} and P_{90} confidence curves. The quality of the realizations sampling to approximate the uranium variability of the whole set is deemed satisfactory.

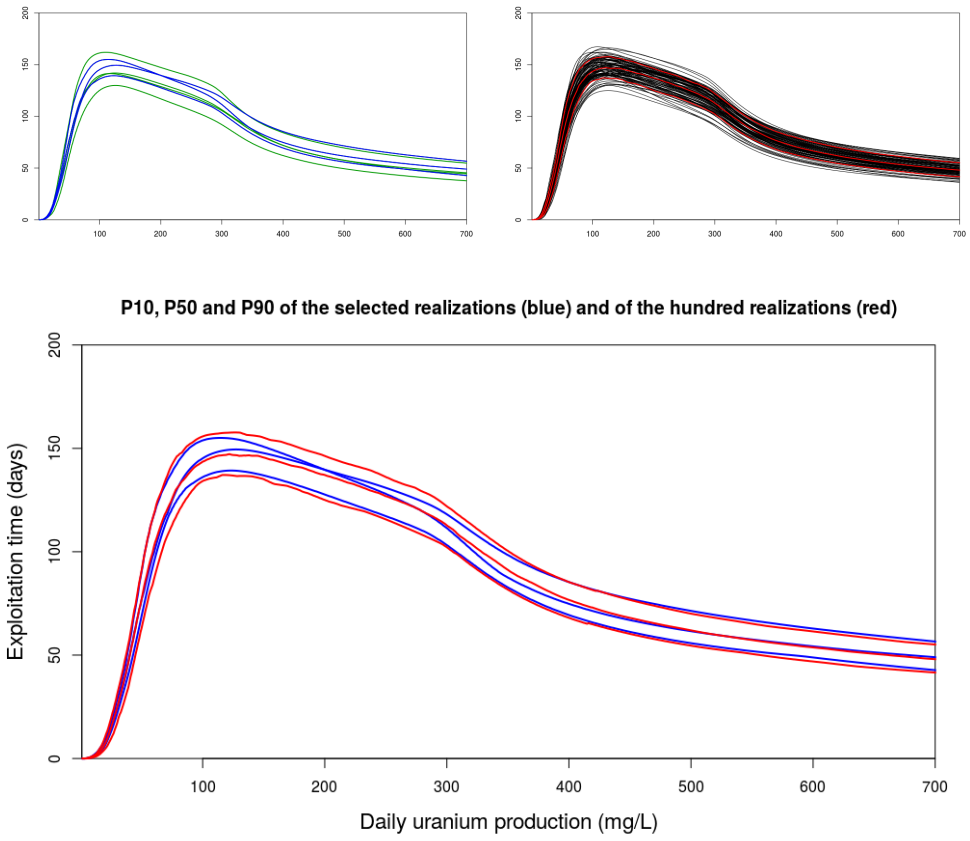

Figure 14: *Uranium production UQ from the selected realizations compared to uranium production UQ of the reference realization set. The top left graph shows the UQ of the sampled realizations and the top right graph, the uranium production UQ of the whole realization set. The third graph shows the comparison between the UQ of the whole set of realization (red) and the sampled set of realizations (blue)*

4.2 Validation on a second production block

4.2.1 Production block description

The validation aims to test the scenario reduction methodology on a second production block, PB02, with an other well field geometry, a different, yet similar, geostatistical model, whose N realizations are conditioned to other drill holes data, and an other discretization grid. The mineralization is also irregularly distributed on the whole reservoir thickness as shown on three vertical cross section of the production block in figure 15.

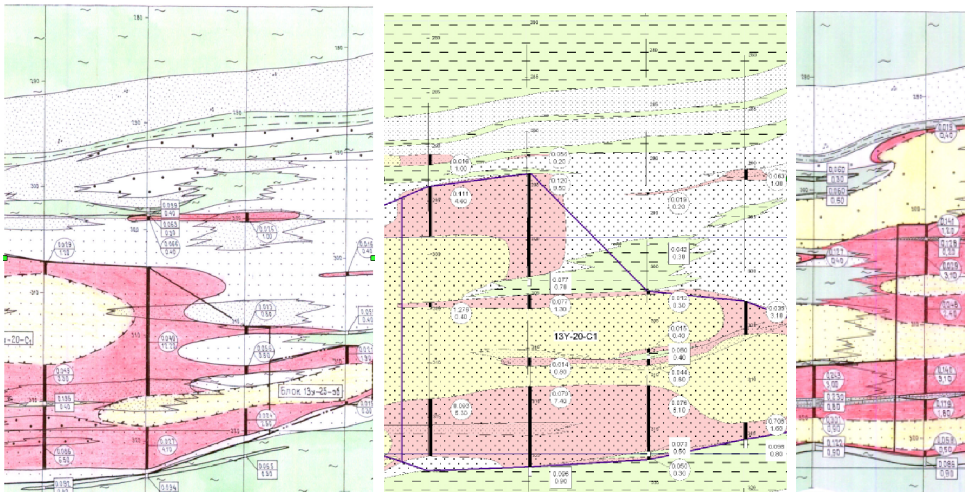

Figure 15: *Three parallel vertical cross section of PB02 showing lithotype and mineralization distribution. Green are impermeable shale rocks. Yellow and white are barren sandrocks. Red is uranium ore sandrocks*

The well field of the new production block consists of 48 injector and 13 production wells and have a different shape with respect to PB01. The geostatistical simulations are performed on a different discretization grid than PB01 : a 10x10x1m 3D grid containing 185000 voxels. This is the second common discretization of 3D Grid used at Orano. The OMR facies proportions and lithotype proportions used for the geostatistical simulations are also different. The OMR proportions differences are synthetized in table 4 while the lithotype proportion differences are shown in table 5. These values illustrate some important geological differences such as the impermeable shale proportion. Injection and production flows for mineral tracer recovery and uranium ISR exploitation are constant during the 1550 days exploitation time. Like the previous production block, a single parallelized uranium ISR simulation on 16 to 24 CPU with HYTEC approximately lasts one day.

Production block	Oxydized baren	Mineralization	Reduced baren
PB01	28%	18%	64%
PB02	22%	16%	62%

Table 4: *OMR lithofacies proportion comparison between PB01 and PB02*

Production block	Impermeable	Sand	Coarse Sand
PB01	28%	62%	10%
PB02	52%	21%	27%

Table 5: *OMR lithofacies proportion comparison between PB01 and PB02*

4.2.2 Description of the realizations

The parameters of the scenario reduction are fixed at the values set in PB01: 100 realizations and descriptors used to discriminate realizations (i.e. mineral tracer features). Concerning ISR modelling with reactive transport simulation, injection and production flow are still constant during time. The exploitation of the mineral tracer and the exploitation of uranium by ISR are simulated by reactive transport for 1550 days. Table 6 summarizes the time gain with the tracer instead of ISR simulations on the realization set. We can notice a median computational time improvement of a factor four. But, we also notice that some tracer simulations last more than one day. This is certainly a consequence of irreducible flow field resolution difficulties that can happen when the discretization grid is not fine enough to ensure the numerical stability of the fluid flow solver.

	Min (h)	Median (h)	Mean (h)	Max (h)
PB02 - tracer simulations	1.6	3.5	5.5	36.2
PB02 - ISR simulations	10.5	13.6	13.8	31.9

Table 6: *Simulation time comparison on PB02 between ISR simulations and tracer simulations*

As in the previous block, the graphs in figure 16 compare the daily tracer production and the cumulative tracer production in the new production block. The production variability between realizations is the consequence of the geological variability. The cumulative production curves at the end of the simulation have slightly less than 30% differences between minimum and maximum productions. Similarly to the first case, realization descriptor plot for tracer and uranium production show quite good linear structures with an $R^2 = 0.89$ as shown for the maximum daily production picture 17. Table 7 shows the correlations between descriptors computed on the tracers and the uranium production. Just like the first production block, a high correlation between tracer descriptors and uranium production underlines the efficiency of the proxy.

Descriptors	correlation between tracer and uranium production
maximum daily production	0.89
final daily production	0.90
total mass recovered	0.97

Table 7: *Correlation between tracer and uranium production, PB02*

4.2.3 Dissimilarity computation and realizations subset selection

Similarly to the first production block, multidimensional scaling is applied. The cumulative variance of the principal components are shown table 8. The first two principal components contain more than 99% of the variance. This justifies to apply k-medoïds in two dimensions.

	1^{st} component	2^{nd} component	3^{rd} component
Cumulative variance	90.0%	99.7%	100%

Table 8: *Cumulative variance explained by the principal components of the MDS on PB02*

To assess the validity of the previously chosen number of clusters, the average silhouette of clustering results is computed as a function of the number of considered clusters. The result is shown in figure 18. As said earlier in the paper, the higher the silhouette, the better the clustering of the realization set. Regarding to the results, we choose again seven representative realizations.

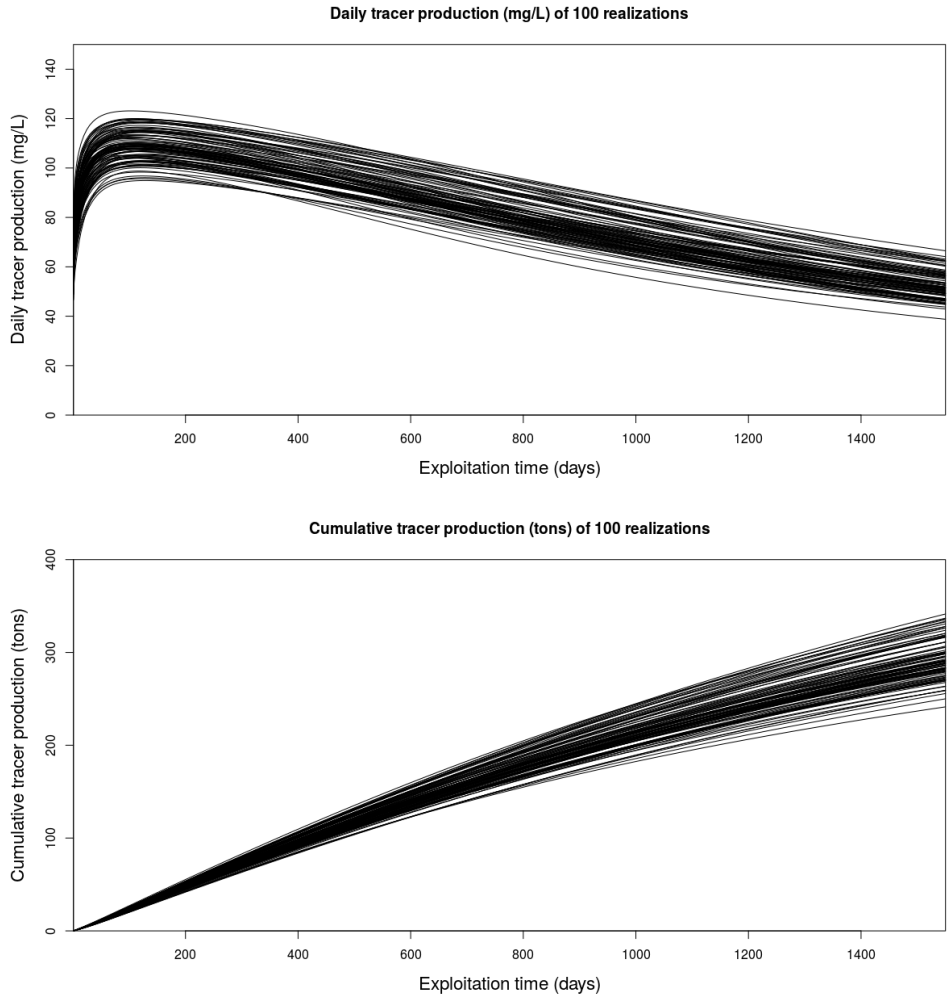

Figure 16: *Daily and cumulative mineral tracer production for 100 realizations - validation block*

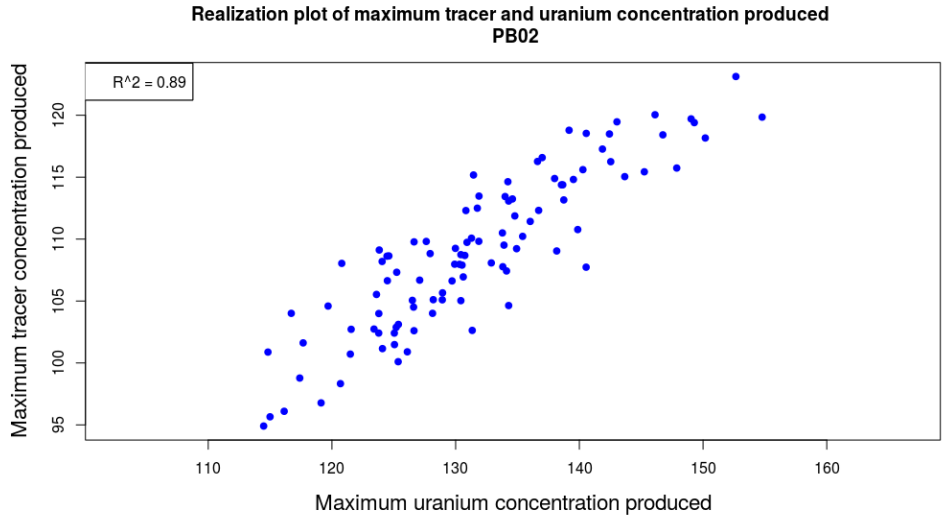

Figure 17: *Comparison between maximum daily tracer production and maximum daily uranium production for the 100 realizations - PB02*

The uranium production UQ for PB02 using scenario reduction is compared with the UQ obtained by direct propagation of the geological uncertainty. The graphs in figure 19 compare

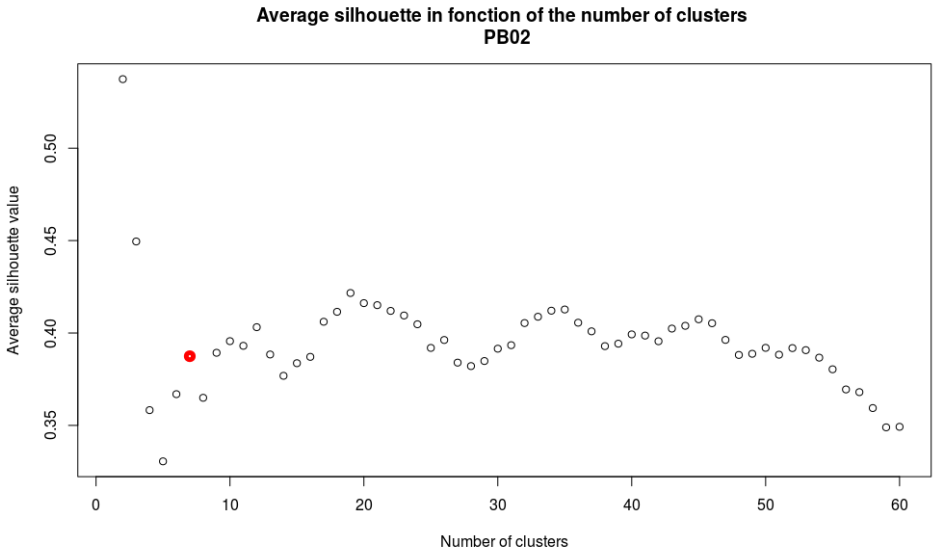

Figure 18: *Value of the average silhouette in PB02 as a function of the number of cluster*

the UQ using the proposed methodology, and the UQ using uranium exploitation simulations on the whole set of realizations. As for the previous production block, the reference median production curve and the associated error curves are close to the approximated curves using the realization selection.

The results on PB02 validate the choice of the different parameters set on PB01. They show the robustness of the methodology to a change in well field geometry and geological drill hole data. In conclusion, the proposed scenario reduction methodology allows to approximate the uranium production variability of a large set of realizations using mineral tracer ISR recovery with only seven uranium ISR exploitation simulations. So finally, using four to five time faster proxy simulations, and performing only 7 full reactive transport simulations to model the ISR exploitation, allows to quantify the uncertainties on the uranium production. The relative gain of computational time is more important when the size of the initial realization set increases. The second reason to use a large realization set for scenario reduction is the better sampling of the possible geological property distribution.

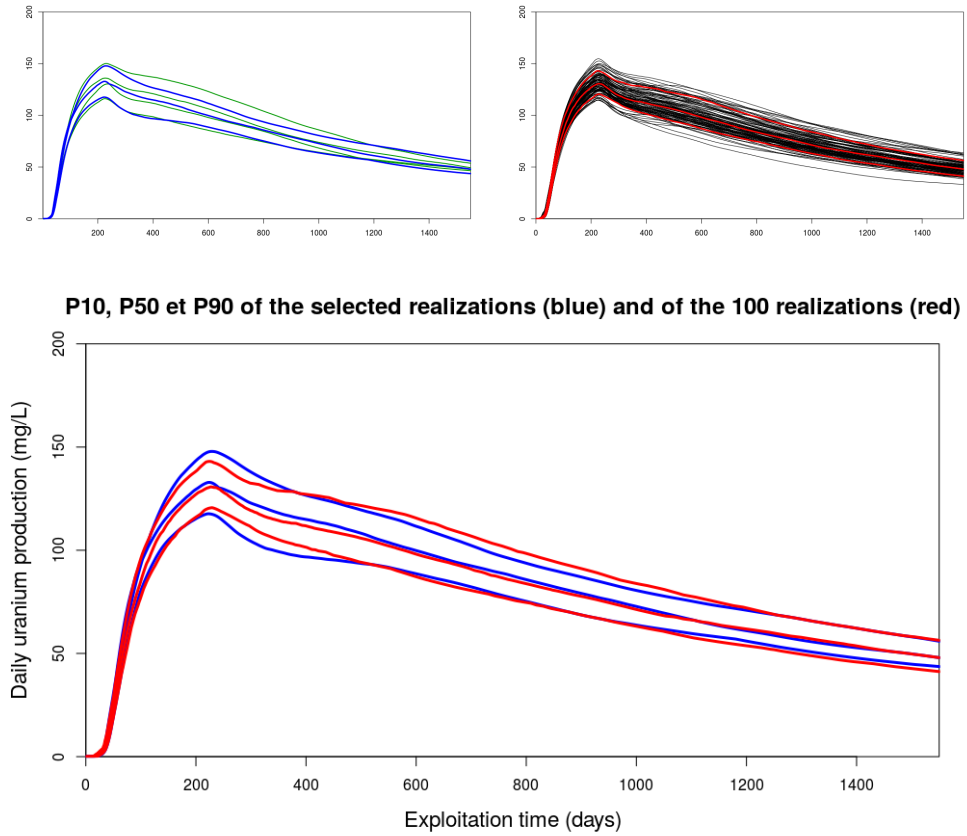

Figure 19: *Uranium production UQ of selected realizations compared to uranium production UQ of the reference realization set. The top left graph shows the UQ of the sampled realizations and the top right graph the uranium production UQ of the whole realization set. The third graph compares the UQ of the whole set of realizations (red) and the sampled set of realizations (blue)*

5 Conclusion

This paper demonstrates the validity of the scenario reduction method in the ISR mining context to quantify the production uncertainty. This has never been done before due to the difficulty to find an adequate proxy to synthesize the phenomena involved during the exploitation, such as kinetically controlled dissolution and dissolution equilibrium of the mineral of interest. Our developed proxy is based on the leaching of a single artificial mineral which approximates the chemical processes involved during uranium ISR exploitation. It conveniently discriminates the realizations so that k-medoids clustering in the space of its outcome leads to the selection of a relevant weighted subset that can approximate accurately the uranium production uncertainties.

It is worth noting however that the resulting uncertainty quantification results from a series of approximations that can be a source of a misrepresentation of the uncertainty. The first source is the proxy choice, which is an approximation of a more complex model. The second source is the descriptor choice, which is also a simplification of the proxy result, but provides an interpretable and easy to handle description of each realization. The last approximation is due to the selection of a limited number of representative realizations. Nevertheless the good quality of the results shows that the approximation error is limited.

This work allows to perform uncertainty quantification at the scale of the production block to evaluate our understanding of the reservoir uncertainty. However the mine consists of several tens of production blocks in activities at the same time. One of the important challenges in ISR mining management is the mining sequence scheduling, which is the production block opening/closure timing. We are currently working on uranium production uncertainty management at the mine

scale, and particularly its integration in the mining sequence definition workflow. The objective is to upscale the uncertainty computation from the production block to the treatment plant scale (around twenty blocks) or at least to a secondary pipe scale (around five blocks).

A single parallelized uranium ISR simulation on 16 to 24 CPUs lasts around one day, depending on the number of considered CPUs, the resolution complexity of geochemical speciations, the size of the grid and the simulated exploitation time. The use of a single chemical element to approximate the uranium production reduces the necessary CPU time by a factor four to six. The computational time gained is certain but limited. Several research directions are currently investigated to increase this gain: decrease the complexity of the fluid flow computation in the production block, use the simulated mineral tracer exploitation on a reduced time period to describe the realizations, while computing the uranium exploitation simulation on the full time period, and improve the parallelization scheme of HYTEC. Finally, validation tests have to continue on other production blocks to test the proxy and the methodology on other particular geology. Indeed, the mineralization in roll front deposit can get many different geometries and the three different facies of the OMR property can also get different distributions than these two cases.

This work presents a method which focuses on the representation of the aleatory uncertainty and then get an approximation of the interest variable uncertainty. The propagation of the geostatistical model parameters uncertainty (e.g. variograms and facies proportions) is out of the scope of this study. This would involve an increase in the number of geostatistical realizations as the sample of realizations should then be representative of a set of distributions. Considering 100 realizations to be representative of the geostatistical model probability distribution is already restrictive and this would worsen when making the parameters value vary as well. Nevertheless, it is worth noting that the statistical fluctuations inherent to stochastic simulations makes variograms, means and facies proportions vary slightly from one realization to the other [25].

Geochemical parameters uncertainty management is a great concern in ISR exploitation and has a high impact on the uranium leaching, and therefore, on the uranium production. Determination of parameters is tricky since characterization at the core scale provides a poor description of the block scale. Values used are usually derived from model adjustment on production data.

In our case, the interest variable is the uranium production along time we get from coupled fluid flow and geochemical reaction simulations. However this methodology could be used in various domains which consider fluid flow processes and chemical reactions in an uncertain porous medium, such as pollution impact studies, [36] for example, or ISR of other metal, such as copper [39], than uranium.

References

[1] Ambrose, W.A., Lakshminarasimhan, S., Holtz, M., Núñez-López, V., Hovorka, S.D., Duncan, I.: Geologic factors controlling co 2 storage capacity and permanence: case studies based on experience with heterogeneity in oil and gas reservoirs applied to co 2 storage. Environmental Geology **54**(8), 1619 (2008)

[2] Armstrong, M., Galli, A., Beucher, H., Loc'h, G., Renard, D., Doligez, B., Eschard, R., Geffroy, F.: Plurigaussian simulations in geosciences. Springer Science & Business Media (2011)

[3] Arnold, D., Demyanov, V., Christie, M., Bakay, A., Gopa, K.: Optimisation of decision making under uncertainty throughout field lifetime: A fractured reservoir example. Computers & Geosciences **95**, 123–139 (2016)

[4] Bardy, G., Biver, P.: Sorting reservoir models according to flow criteria: A methodology, using fast marching methods and multi-dimensional scaling. In: Mathematics of Planet Earth, pp. 643–646. Springer (2014)

[5] Bardy, G., Biver, P., Caumon, G., Renard, P.: Oil production uncertainty assessment by predicting reservoir production curves and confidence intervals from arbitrary proxy responses. Journal of Petroleum Science and Engineering **176**, 116–125 (2019)

[6] Benes, V., Boitsov, A., Fuzlullin, M., Hunter, J., Mays, W., Novak, J., Slezak, J., Stover, D., Tweeton, D., Underhill, D.: Manual of acid in situ leach uranium mining technology. International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria p. 294 (2001)

[7] Bouquet, S., Bruel, D., De Fouquet, C.: Influence of heterogeneities and upscaling on co2 storage prediction at large scale in deep saline aquifer. Energy Procedia **37**, 4445–4456 (2013)

[8] Chiles, J.P., Delfiner, P.: Geostatistics: modeling spatial uncertainty, vol. 497. John Wiley & Sons (2009)

[9] Cox, T.F., Cox, M.A.: Multidimensional scaling. Chapman and hall/CRC (2000)

[10] De Lucia, M., Lagneau, V., De Fouquet, C., Bruno, R.: The influence of spatial variability on 2d reactive transport simulations. Comptes Rendus Geoscience **343**(6), 406–416 (2011)

[11] De Windt, L., Van Der Lee, J., Lagneau, V.: Cas de références hytec - version 3.6. Tech. rep., Centre de Géosciences, Ecole des Mines de Paris (2007)

[12] Deraisme, J., Rivoirard, J., Carrasco, P.: Multivariate uniform conditioning and block simulations with discrete gaussian model: application to chuquicamata deposit. In: VIII international geostatistics congress, GEOSTATS, pp. 69–78 (2008)

[13] Dowd, P.: Quantifying the impacts of uncertainty. In: Handbook of Mathematical Geosciences, pp. 349–373. Springer (2018)

[14] Essaid, H.I., Hess, K.M.: Monte carlo simulations of multiphase flow incorporating spatial variability of hydraulic properties. Groundwater **31**(1), 123–134 (1993)

[15] Fontaine, L., Beucher, H.: Simulation of the muyumkum uranium roll front deposit by using truncated plurigaussian method. In: 6th International Mining Geology Conference," Rising the challenge", p. 5p (2006)

[16] Freulon, X.: Conditional simulation of a gaussian random vector with non linear and/or noisy observations. In: Geostatistical Simulations, pp. 57–71. Springer (1994)

[17] Garnier, V.: Modélisation stochastique de modèles de blocs 3d renseignés en lithologie,oxydoréduction et teneur. Tech. rep., AREVA Mines (2014)

[18] Geman, S., Geman, D.: Stochastic relaxation, gibbs distributions, and the bayesian restoration of images. IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence (6), 721–741 (1984)

[19] IAEA: In Situ Leach Uranium Mining: An Overview of Operations. No. NF-T-1.4 in Nuclear Energy Series. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Vienna (2016). URL https://www.iaea.org/publications/10974/in-situ-leach-uranium-mining-an-overview-of-operations

[20] Josset, L., Ginsbourger, D., Lunati, I.: Functional error modeling for uncertainty quantification in hydrogeology. Water resources research **51**(2), 1050–1068 (2015)

[21] Juanes, R., Spiteri, E., Orr Jr, F., Blunt, M.: Impact of relative permeability hysteresis on geological co2 storage. Water resources research **42**(12) (2006)

[22] Kaufman, L., Rousseeuw, P.J.: Partitioning around medoids (program pam). Finding groups in data: an introduction to cluster analysis pp. 68–125 (1990)

[23] Lagneau, V., Regnault, O., Descostes, M.: Industrial deployment of reactive transport simulation: An application to uranium in situ recovery. Reviews in Mineralogy and Geochemistry **85**(1), 499–528 (2019)

[24] Lagneau, V., Regnault, O., Okhulkova, T., Le Beux, A.: Predictive simulation and optimization of uranium in situ recovery using 3d reactive transport simulation at the block scale. ALTA 2018 ISR Proceedings pp. 55–62 (2018)

[25] Lantuéjoul, C.: Geostatistical simulation: models and algorithms. Springer Science & Business Media (2013)

[26] van der Lee, J.: thermodynamic and mathematical concepts of chess. Tech. rep., Ecole des Mines de Paris, Fontainebleau (1998)

[27] Nguyen, V., Pinder, G., Gray, W., Botha, J.: Numerical simulation of uranium in-situ mining. Chemical engineering science **38**(11), 1855–1862 (1983)

[28] Nos, J., Lagneau, V., Langlais, V.: Reactive transport upscaling at the darcy scale: A new flow rate based approach raises the unsolved issue of porosity upscaling. Advances in water resources **34**(10), 1239–1248 (2011)

[29] Petit, G., De Boissezon, H., Langlais, V., Rumbach, G., Khairuldin, A., Oppeneau, T., Fiet, N.: Application of stochastic simulations and quantifying uncertainties in the drilling of roll front uranium deposits. In: Geostatistics Oslo 2012, pp. 321–332. Springer (2012)

[30] Rahim, S., Li, Z.: Reservoir geological uncertainty reduction: an optimization-based method using multiple static measures. Mathematical Geosciences **47**(4), 373–396 (2015)

[31] Regnault, O., Lagneau, V., Fiet, N.: 3d reactive transport simulations of uranium in situ leaching: Forecast and process optimization. In: Uranium-Past and Future Challenges, pp. 725–730. Springer (2015)

[32] Rongier, G., Collon, P., Renard, P., Straubhaar, J., Sausse, J.: Comparing connected structures in ensemble of random fields. Advances in water resources **96**, 145–169 (2016)

[33] Rousseeuw, P.J.: Silhouettes: a graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. Journal of computational and applied mathematics **20**, 53–65 (1987)

[34] Scheidt, C., Caers, J.: Representing spatial uncertainty using distances and kernels. Mathematical Geosciences **41**(4), 397–419 (2009)

[35] Scheidt, C., Caers, J., et al.: Uncertainty quantification in reservoir performance using distances and kernel methods–application to a west africa deepwater turbidite reservoir. SPE Journal **14**(04), 680–692 (2009)

[36] Scheidt, C., Li, L., Caers, J.: Designing uranium contaminant remediation in united state. In: quantifying Uncertainty in Subsurface Systems, vol. 236, chap. 8.5, pp. 245–254. John Wiley & Sons (2018)

[37] Shirangi, M.G., Durlofsky, L.J.: A general method to select representative models for decision making and optimization under uncertainty. Computers & geosciences **96**, 109–123 (2016)

[38] Simon, R.B., Thiry, M., Schmitt, J.M., Lagneau, V., Langlais, V., Bélières, M.: Kinetic reactive transport modelling of column tests for uranium in situ recovery (isr) mining. Applied geochemistry **51**, 116–129 (2014)

[39] Sinclair, L., Thompson, J.: In situ leaching of copper: Challenges and future prospects. Hydrometallurgy **157**, 306–324 (2015)

[40] Van Der Lee, J., De Windt, L., Lagneau, V., Goblet, P.: Module-oriented modeling of reactive transport with hytec. Computers & Geosciences **29**(3), 265–275 (2003)

Bibliographie

D. Arnold, V. Demyanov, M. Christie, A. Bakay, and K. Gopa. Optimisation of decision making under uncertainty throughout field lifetime : A fractured reservoir example. *Computers & Geosciences*, 95 :123–139, 2016.

G. Bardy and P. Biver. Sorting reservoir models according to flow criteria : A methodology, using fast marching methods and multi-dimensional scaling. In *Mathematics of Planet Earth*, pages 643–646. Springer, 2014.

G. Bardy, P. Biver, G. Caumon, and P. Renard. Oil production uncertainty assessment by predicting reservoir production curves and confidence intervals from arbitrary proxy responses. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 176 :116–125, 2019.

S. Bouquet, D. Bruel, and C. De Fouquet. Influence of heterogeneities and upscaling on co2 storage prediction at large scale in deep saline aquifer. *Energy Procedia*, 37 :4445–4456, 2013.

J. Caers. Efficient gradual deformation using a streamline-based proxy method. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 39(1-2) :57–83, 2003.

J. Carrayrou, R. Mosé, and P. Behra. Operator-splitting procedures for reactive transport and comparison of mass balance errors. *Journal of Contaminant Hydrology*, 68(3-4) :239–268, 2004.

J. Carrayrou, J. Hoffmann, P. Knabner, S. Kräutle, C. De Dieuleveult, J. Erhel, J. Van Der Lee, V. Lagneau, K. U. Mayer, and K. T. Macquarrie. Comparison of numerical methods for simulating strongly nonlinear and heterogeneous reactive transport problems—the momas benchmark case. *Computational Geosciences*, 14(3) :483–502, 2010.

CauldronEnergy. Coupe schématique d'un roll front. `http://www.cauldronenergy.com.au/wp-content/uploads/2015/08/21d1f-situ-uranium-mining-process-300x169.jpg`, 2015. Accessed : 2020-06-23.

S.-H. Cha. Comprehensive survey on distance/similarity measures between probability density functions. *City*, 1(2) :1, 2007.

J.-P. Chilès and N. Desassis. Fifty years of kriging. In *Handbook of mathematical geosciences*, pages 589–612. Springer, 2018.

J.-P. Chilès and P. Delfiner. *Geostatistics : modeling spatial uncertainty*, volume 497. John Wiley & Sons, 2009.

T. F. Cox and M. A. Cox. *Multidimensional scaling*. Chapman and hall/CRC, 2000.

M. J. Crane and M. J. Blunt. Streamline-based simulation of solute transport. *Water Resources Research*, 35(10) :3061–3078, 1999.

C. de Fouquet. Reminders on the conditioning kriging. In M. Armstrong and P. A. Dowd, editors, *Geostatistical Simulations*, pages 131–145, Dordrecht, 1994. Springer Netherlands. ISBN 978-94-015-8267-4.

M. De Lucia, V. Lagneau, C. De Fouquet, and R. Bruno. The influence of spatial variability on 2d reactive transport simulations. *Comptes Rendus Geoscience*, 343(6) :406–416, 2011.

M. De Lucia, T. Kempka, J. Jatnieks, and M. Kühn. Integrating surrogate models into subsurface simulation framework allows computation of complex reactive transport scenarios. *Energy Procedia*, 125 :580–587, 2017.

L. de Windt, J. Van Der Lee, and J.-M. Schmitt. Modélisation en géochimie des eaux concepts et applications en environnement. *Techniques de l'ingénieur Chimie des milieux complexes*, base documentaire : TIB529DUO.(ref. article : af6530), 2005. fre.

J. Deraisme, J. Rivoirard, and P. Carrasco. Multivariate uniform conditioning and block simulations with discrete gaussian model : application to chuquicamata deposit. In *VIII international geostatistics congress, GEOSTATS*, pages 69–78, 2008.

N. Desassis, D. Renard, H. Beucher, S. Petiteau, and X. Freulon. A pairwise likelihood approach for the empirical estimation of the underlyingvariograms in the plurigaussian models. To be submitted to Spatial Statistics., Oct. 2015. URL `https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01213962`.

A. Dubille-Auchère. Hytec simulation of md2 magistral, ikansk level. Technical report, Orano Mining, 2020.

X. Emery. Change-of-support models and computer programs for direct block-support simulation. *Computers & geosciences*, 35(10) :2047–2056, 2009.

X. Emery and D. A. Silva. Conditional co-simulation of continuous and categorical variables for geostatistical applications. *Computers & Geosciences*, 35(6) :1234–1246, 2009.

X. Freulon. Conditional simulation of a gaussian random vector with non linear and/or noisy observations. In *Geostatistical Simulations*, pages 57–71. Springer, 1994.

X. Freulon. Mise à jour de la teneur en uranium de la modélisation stochastique des blocs tsu30-33 en intégrant les puits technologiques. Technical report, AREVA Mines, 2017.

V. Garnier. Modélisation stochastique de modèles de blocs 3d renseignés en lithologie,oxydoréduction et teneur. Technical report, AREVA Mines, 2014.

S. Geman and D. Geman. Stochastic relaxation, gibbs distributions, and the bayesian restoration of images. *IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence (6)*, pages 721–741, 1984.

GoldSim. Website goldsim. `https://www.goldsim.com/`, 2021. Accessed : 2021-01-15.

R. Hecht-Nielsen. Theory of the backpropagation neural network. In *Neural networks for perception*, pages 65–93. Elsevier, 1992.

D. P. Huttenlocher, G. A. Klanderman, and W. J. Rucklidge. Comparing images using the hausdorff distance. *IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence*, 15(9) :850–863, 1993.

IAEA. *In Situ Leach Uranium Mining : An Overview of Operations*. Number NF-T-1.4 in Nuclear Energy Series. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Vienna, 2016. ISBN 978-92-0-102716-0. URL `https://www.iaea.org/publications/10974/in-situ-leach-uranium-mining-an-overview-of-operations`.

e. a. Ivonne Couret. *Information digest 2013-1014*. United State Nuclear Regulatory Commission, 2013.

J. Jatnieks, M. De Lucia, D. Dransch, and M. Sips. Data-driven surrogate model approach for improving the performance of reactive transport simulations. *Energy Procedia*, 97 :447–453, 2016.

L. Josset, D. Ginsbourger, and I. Lunati. Functional error modeling for uncertainty quantification in hydrogeology. *Water resources research*, 51(2) :1050–1068, 2015.

L. Kaufman and P. J. Rousseeuw. Partitioning around medoids (program pam). *Finding groups in data : an introduction to cluster analysis*, pages 68–125, 1990.

D. P. Kingma and J. Ba. Adam : A method for stochastic optimization. *arXiv preprint arXiv :1412.6980*, 2014.

K. G. Knauss, J. W. Johnson, and C. I. Steefel. Evaluation of the impact of co2, co-contaminant gas, aqueous fluid and reservoir rock interactions on the geologic sequestration of co2. *Chemical geology*, 217(3-4) :339–350, 2005.

V. Lagneau, O. Regnault, T. Okhulkova, and A. Le Beux. Predictive simulation and optimization of uranium in situ recovery using 3d reactive transport simulation at the block scale. *ALTA 2018 ISR Proceedings*, pages 55–62, 2018.

V. Lagneau, O. Regnault, and M. Descostes. Industrial deployment of reactive transport simulation : An application to uranium in situ recovery. *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*, 85(1) :499–528, 2019.

E. Laloy and D. Jacques. Emulation of cpu-demanding reactive transport models : A comparison of gaussian processes, polynomial chaos expansion, and deep neural networks. *Computational Geosciences*, 23(5) :1193–1215, 2019.

V. Langlais, H. de Boissezon, M. Brouand, Y. Deschamps, M. Descostes, N. Fiet, C. Gounou, T. Lefebvre, J. Nos, A. Nyuryupova, G. Petit, V. Rayot, O. Regnault, and J.-M. Schmitt. Synthèse du projet isr 2005-2011. Report, AREVA Mines, 2013.

C. Lantuéjoul. *Geostatistical simulation : models and algorithms*. Springer Science & Business Media, 2013.

A. M. Leal, D. A. Kulik, and M. O. Saar. Ultra-fast reactive transport simulations when chemical reactions meet machine learning : chemical equilibrium. *arXiv preprint arXiv :1708.04825*, 2017.

A. M. Leal, S. Kyas, D. A. Kulik, and M. O. Saar. Accelerating reactive transport modeling : On-demand machine learning algorithm for chemical equilibrium calculations. *Transport in Porous Media*, 2020.

S. Lopez, I. Cojan, J. Rivoirard, and A. Galli. Process-based stochastic modelling : meandering channelized reservoirs. *Analogue and Numerical Modelling of Sedimentary Systems : From Understanding to Prediction, Wiley, Oxford, UK*, pages 139–144, 2009.

G. d. Marsily. *Hydrogéologie quantitative*. Number BOOK. Masson, 1981.

G. Matheron. La théorie des variables régionalisées et leur estimation. *Les Cahiers du Centre de Morphologie Mathématique de Fontainebleau, école Nationale des Mines de Paris, Fascicule*, 5, 1970.

G. Matheron. The intrinsic random functions and their applications. *Advances in applied probability*, 5(3) :439–468, 1973.

G. Matheron, H. Beucher, C. De Fouquet, A. Galli, D. Guerillot, C. Ravenne, et al. Conditional simulation of the geometry of fluvio-deltaic reservoirs. In *Spe annual technical conference and exhibition*. Society of Petroleum Engineers, 1987.

F. Morel. *Principles of aquatic chemistry*, volume 446. Wiley New York, 1983.

G. Nativel-Fontaine and S. Audrix. Dnn. `http://newexplorers.fr/deep_learning`, 2018. Accessed : 2020-12-06.

M. Pereira. *Champs aléatoires généralisés définis sur des variétés riemanniennes : théorie et pratique*. PhD thesis, Paris Sciences et Lettres, 2019.

L. E. Peterson. K-nearest neighbor. *Scholarpedia*, 4(2) :1883, 2009.

G. Petit, H. De Boissezon, V. Langlais, G. Rumbach, A. Khairuldin, T. Oppeneau, and N. Fiet. Application of stochastic simulations and quantifying uncertainties in the drilling of roll front uranium deposits. In *Geostatistics Oslo 2012*, pages 321–332. Springer, 2012.

S. Petiteau. Mise à jour de la modélisation stochastique des blocs tsu30-33 en intégrant les puits technologiques. Technical report, AREVA Mines, 2015.

S. Rahim and Z. Li. Reservoir geological uncertainty reduction : an optimization-based method using multiple static measures. *Mathematical Geosciences*, 47(4) :373–396, 2015.

M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis. Physics-informed neural networks : A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378 :686–707, 2019.

O. Regnault, V. Lagneau, and N. Fiet. 3d reactive transport simulations of uranium in situ leaching : Forecast and process optimization. In *Uranium-Past and Future Challenges*, pages 725–730. Springer, 2015.

V. Robin, E. Tertre, O. Regnault, and M. Descostes. Dissolution of beidellite in acidic solutions : Ion exchange reactions and effect of crystal chemistry on smectite reactivity. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 180 :97–108, 2016.

G. Rongier. *Connectivity of channelized sedimentary bodies : analysis and simulation strategies in subsurface modeling*. PhD thesis, Universitée de Lorraine ; Universitée de Neuchâtel, 2016.

F. Rosenblatt. Principles of neurodynamics. perceptrons and the theory of brain mechanisms. Technical report, Cornell Aeronautical Lab Inc Buffalo NY, 1961.

P. J. Rousseeuw. Silhouettes : a graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. *Journal of computational and applied mathematics*, 20 :53–65, 1987.

A. Saltelli, S. Tarantola, F. Campolongo, and M. Ratto. *Sensitivity analysis in practice : a guide to assessing scientific models*, volume 1. Wiley Online Library, 2004.

C. Scheidt and J. Caers. Representing spatial uncertainty using distances and kernels. *Mathematical Geosciences*, 41(4) :397–419, 2009.

C. Scheidt, J. Caers, et al. Uncertainty quantification in reservoir performance using distances and kernel methods–application to a west africa deepwater turbidite reservoir. *SPE Journal*, 14(04) : 680–692, 2009.

N. Seigneur, E. Kangni-Foli, V. Lagneau, A. Dauzères, S. Poyet, P. Le Bescop, E. L'Hôpital, and J.-B. d. de Lacaillerie. Predicting the atmospheric carbonation of cementitious materials using fully coupled two-phase reactive transport modelling. *Cement and Concrete Research*, 130 :105966, 2020.

J. Shawe-Taylor, N. Cristianini, et al. *Kernel methods for pattern analysis*. Cambridge university press, 2004.

M. G. Shirangi and L. J. Durlofsky. A general method to select representative models for decision making and optimization under uncertainty. *Computers & geosciences*, 96 :109–123, 2016.

R. B. Simon, M. Thiry, J.-M. Schmitt, V. Lagneau, V. Langlais, and M. Bélières. Kinetic reactive transport modelling of column tests for uranium in situ recovery (isr) mining. *Applied geochemistry*, 51 :116–129, 2014.

C. Steefel, C. Appelo, B. Arora, D. Jacques, T. Kalbacher, O. Kolditz, V. Lagneau, P. Lichtner, K. U. Mayer, J. Meeussen, et al. Reactive transport codes for subsurface environmental simulation. *Computational Geosciences*, 19(3) :445–478, 2015.

C. I. Steefel, D. J. DePaolo, and P. C. Lichtner. Reactive transport modeling : An essential tool and a new research approach for the earth sciences. *Earth and Planetary Science Letters*, 240(3-4) : 539–558, 2005.

P. Tahmasebi. Multiple point statistics : a review. In *Handbook of mathematical geosciences*, pages 613–643. Springer, 2018.

J. Van Der Lee, L. De Windt, V. Lagneau, and P. Goblet. Module-oriented modeling of reactive transport with hytec. *Computers & Geosciences*, 29(3) :265–275, 2003.

M. Vergnaud, V. Lagneau, and A. Le Beux. 2d reactive transport simulation of well clogging during acidic uranium in situ recovery process. In *24th Annual Conference Proceedings : In Situ Recovery Conference*, pages 31–45, 2019.

H. Wackernagel. Gaussian anamorphosis with hermite polynomials. In *Multivariate Geostatistics*, pages 238–249. Springer, 2003.

J. Yin, H.-Y. Park, A. Datta-Gupta, M. J. King, and M. K. Choudhary. A hierarchical streamline-assisted history matching approach with global and local parameter updates. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 80(1) :116–130, 2011.

RÉSUMÉ

La Lixiviation In-Situ d'uranium, ou *In-Situ Recovery* (ISR), est basée sur la lixiviation directe des minéraux uranifères au coeur du gisement par une solution minière injectée. Les résultats des écoulements et des réactions chimiques dans le réservoir sont difficiles à prédire en raison des incertitudes géochimiques, pétrophysiques et géologiques. Les codes de simulation de transport réactif utilisés pour modéliser l'ISR sont particulièrement sensibles à la distribution spatiale des propriétés physiques et chimiques dans le dépôt. Ainsi, la modélisation géostatistique est utilisée pour représenter l'incertitude de la répartition spatiale des propriétés géologiques. On peut représenter cette incertitude par un grand nombre de réalisations du modèle géostatistique. La propagation directe des incertitudes géologiques est difficile à résoudre en contexte industriel en raison du temps CPU nécessaire pour effectuer une simulation de l'ISR. Les travaux réalisés dans cette thèse présentent différents moyens de propager l'incertitude géologique en incertitude sur la production d'uranium avec un coût en temps de calcul réduit. On utilise pour cela la méthode de réduction de scénarios, qui permet de propager parcimonieusement l'incertitude. Un sous-ensemble de simulations géostatistiques est sélectionné pour approximer la variabilité d'un ensemble plus large. La sélection est obtenue en utilisant un proxy de la simulation de transport réactif. La principale contribution de ce travail est la construction de différents proxys pour approximer la lixiviation de l'uranium. Ils permettent de reproduire la dissimilarité des réalisations en terme de production d'uranium. Ensuite, les simulations de l'ISR effectuées dans les réalisations géostatistiques sélectionnées donnent une approximation de la variabilité de production d'uranium de l'ensemble des réalisations. Cette approximation est enfin utilisée pour quantifier les incertitudes de la production d'uranium sur des cas réels. Finalement, la propagation de l'incertitude de production de l'échelle du bloc de production à l'échelle de la mine est développée. Par ailleurs, un travail exploratoire a été mené dans le but d'utiliser des modèles de substitution du solveur de la chimie pour accélérer les simulations de transport réactif.

MOTS CLÉS

Roll Front, Hétérogénéités, Transport Réactif, Réduction de scénarios, Incertitudes

ABSTRACT

Uranium In Situ Recovery (ISR) is based on the direct leaching of the uranium ore in the deposit by a mining solution. Fluid flow and geochemical reaction in the reservoir are difficult to predict due to geological, petrophysical and geochemical uncertainties. The reactive transport simulation code used to model ISR is very sensitive to the spatial distribution of the physical and chemical properties of the deposit. Geostatistical models are used to represent the uncertainty of the spatial distribution of geological properties. The direct propagation of geological uncertainties by multiple ISR mining simulations is intractable in an industrial context. This work presents a way to propagate geological uncertainties into uranium production uncertainties at a reduced computational cost, thanks to a scenario reduction method. A subset of geostatistical simulations is built to approximate the variability of a larger set. The selection is obtained using a proxy of reactive transport simulation. The main contribution of this work is the development of different proxys to approximate the uranium leaching. They allow the discrimination of geostatistical realizations in terms of potential uranium production. Then, the ISR simulation carried out with the selected geostatistical realizations gives an approximation of the uranium production variability over the whole set of geostatistical simulations. This approximation is then used to quantify the uncertainties on the uranium production. The proposed approach is assessed on real case studies. Finally, the propagation of the uranium production uncertainty, assessed by the scenario reduction method, on mining operation planning is developped. Furthermore, an exploratory work about the use of statistical meta-models as chemistry solvers is also presented.

KEYWORDS

Roll front, Heterogeneities, Reactive transport modelling, Scenario reduction, Uncertainty