



**HAL**  
open science

# Modélisation des échanges nappe-rivière à l'échelle intermédiaire : conceptualisation, calibration, simulation

Yohann Cousquer

► **To cite this version:**

Yohann Cousquer. Modélisation des échanges nappe-rivière à l'échelle intermédiaire : conceptualisation, calibration, simulation. Hydrologie. Université Bordeaux Montaigne, 2017. Français. NNT : . tel-01567824

**HAL Id: tel-01567824**

**<https://hal.science/tel-01567824v1>**

Submitted on 24 Jul 2017

**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.

# THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ BORDEAUX MONTAIGNE

École Doctorale Montaigne Humanités (ED 480)

**Discipline : Géosciences  
Spécialité : Hydrogéologie**

présentée par

Yohann COUSQUER

pour obtenir le grade de :

Docteur de l'Université Bordeaux Montaigne

---

## Modélisation des échanges nappe-rivière à l'échelle intermédiaire : conceptualisation, calibration, simulation

---

Directeur de thèse : M. Alain DUPUY

Co-encadrant : M. Alexandre PRYET

Soutenue le 18 janvier 2017 devant le jury composé de :

M.	Hervé JOURDE	Pr., Université de Montpellier	Président du Jury
M.	Philippe ACKERER	DR, CNRS	Rapporteur
M.	Alain DASSARGUES	Pr., Université de Liège	Rapporteur
M.	Nicolas FLIPO	Dr., HDR, Mines ParisTech	Examineur
M.	Olivier ATTEIA	Pr., Bordeaux INP	Examineur
M.	Xavier LITRICO	Dr., HDR, LyRE	Invité



## Résumé

Les interactions entre les eaux souterraines et les eaux de surface sont complexes et jouent un rôle prépondérant dans le fonctionnement des hydrosystèmes, tant en termes quantitatifs (soutien des étiages, événements de crues) que qualitatifs (transport de polluants d'origines agricole ou industrielle). Ces problématiques sont abordées à travers la caractérisation et la modélisation des échanges nappe-rivière à l'échelle intermédiaire [1-10km] avec pour objet d'étude le champ captant de Thil-Gamarde qui alimente la métropole de Bordeaux en eau potable. Ce champ captant est traversé par un cours d'eau, la Jalle de Saint-Médard, vecteur historique de pollutions. L'objectif principal de ces recherches, réalisées dans le cadre d'un projet de recherche intitulé MHYQADEAU, est de proposer un outils d'aide à la gestion de la ressource en eau.

Une revue bibliographique des méthodes d'étude des échanges nappe-rivière fait état de la rareté des méthodes disponibles à l'échelle intermédiaire, et met en avant la nécessité d'employer la modélisation, conjointe à des mesures de terrain, pour étendre l'information locale à l'échelle intermédiaire.

Ainsi, une première phase est constituée d'un volet théorique, visant à améliorer les modalités d'intégration des rivières dans les modèles hydrogéologiques de l'échelle intermédiaire à régionale. Les rivières sont généralement modélisées par l'intermédiaire d'une condition de type Cauchy. Ce type de condition est basé sur une valeur de conductance (Coefficient RIVIÈRE, *CRIV*). La difficulté majeure étant la détermination d'une valeur cohérente du *CRIV*, paramètre qui intègre plusieurs phénomènes physiques. Un outil a été développé pour estimer cette valeur à partir d'informations sur les paramètres hydrodynamiques et géométriques de la nappe et de la rivière. Cet outil consiste en un modèle conceptuel réalisé avec le code de calcul SUTRA, à l'échelle locale d'une section d'aquifère en relation avec une rivière. Contrairement aux autres approches utilisées jusqu'à présent pour obtenir *CRIV*, la méthode proposée prend en compte la taille du maillage, et l'anisotropie de conductivité hydraulique de l'aquifère. Une analyse de sensibilité globale indique la forte sensibilité de ces paramètres sur le *CRIV*. La valeur du *CRIV* obtenue est assortie d'une distribution probabiliste a priori et peut constituer une valeur initiale et de régularisation pour la calibration d'un modèle d'interaction nappe-rivière.

L'étude du champ captant de Thil-Gamarde, qui constitue le cœur de ce travail de thèse, débute avec l'établissement d'un modèle conceptuel

des écoulements et du transport en nappe. Cette partie est fondée essentiellement sur des travaux de terrain visant à acquérir un maximum d'informations sur la zone d'étude. L'approche multidisciplinaire envisagée est constituée de travaux hydrogéologiques complétés par des travaux hydro-chimiques et géophysiques réalisés en parallèle. L'ensemble de ces études ont permis i) de décrire un contexte structural fortement hétérogène, ii) de mettre en place un réseau de suivi hydro-géochimique, iii) de définir les rapports de mélange nappe-rivière en chacun des points d'observation, et iv) d'obtenir de l'information a priori sur les propriétés hydrodynamiques de l'aquifère et du lit de la rivière.

Un modèle 2D horizontal en régime transitoire élaboré avec les codes de calculs MODFLOW pour l'écoulement et MT3DMS pour le transport, a été construit. Les propriétés hydrodynamiques de l'aquifère, transmissivité et coefficient d'emmagasinement, sont paramétrisées à travers un grand nombre de points pilotes. La calibration du modèle est réalisée avec l'algorithme de Gauss-Levenberg Marquardt implémenté dans la suite PEST++. La calibration des paramètres du modèle est réalisée vis-à-vis des chroniques de charge hydraulique mesurées en différents points de l'aquifère ainsi que sur les rapports de mélange nappe-rivière aux ouvrages de production, déduit des campagnes géochimiques. Une régularisation de type Tikhonov sur les valeurs a priori de chaque paramètre est effectuée pour contraindre la calibration. Elle a également été accompagnée par une régularisation mathématique (SVD).

L'étape de calibration des rapports de mélange nappe-rivière simulée avec MT3DMS nécessite des temps de calculs importants. Pour pallier ce problème, un modèle équivalent, rapide, de transport advectif avec le suivi de particules a été développé avec MODPATH. Cette méthode se base sur le décompte de particules semées depuis un point de production (puits) jusqu'à sa source (rivière) (*backward particle tracking*).

L'étape de calibration avec régularisation est menée conjointement sur les modèles d'écoulement et de transport. A l'issue de cette phase de calibration l'estimation des incertitudes paramétriques et prédictives du modèle est conduite par analyse linéaire et méthode du Null Space Monte Carlo (NSMC).

Enfin, quelques scénarios prédictifs de gestion sont présentés afin de répondre à la contrainte majeure de la réduction des proportions d'eau de rivière dans les ouvrages de production.

**Mots clés :** Échanges nappe-rivière, modélisation, MODFLOW, MT3DMS, MODPATH, calibration, simulation

## Remerciements

Après avoir répliqué à de nombreuses reprises à la question récurrente : "Alors, elle avance cette thèse?" par un ironique "oui oui, je suis en train d'écrire les remerciements...", il est temps d'accomplir cette étape plusieurs fois évoquée comme étant le point final à ce qui fut trois années de travail et de vie. Je profite donc avec plaisir de cette section, afin de remercier toutes les personnes qui ont participé à l'aboutissement de ce travail.

Mes pensées vont tout d'abord à mes directeurs de thèse, merci à Alain DUPUY pour sa bienveillance, son soutien et sa confiance tout au long du projet. Merci à Alexandre PRYET pour son accompagnement indéfectible tout au long de ces trois années, son encouragement et son enthousiasme. Merci messieurs pour votre investissement dans ce projet, votre expertise et pour tout ce que vous avez su m'apporter sur le plan professionnel comme personnel. Ce fut un réel plaisir de travailler à leurs côtés

J'aimerais remercier les membres du jury qui m'ont fait l'honneur de juger mon travail : Philippe ACKERER et Alain DASSARGUES pour avoir accepté le rôle de rapporteur de cette thèse, merci à Hervé JOURDE pour avoir accepté la présidence du jury et le rôle d'examineur, merci à Nicolas FLIPO et Olivier ATTEIA d'avoir accepté le rôle d'examineur.

Je tiens à remercier toutes les personnes avec qui j'ai eu le plaisir de collaborer. Merci à Nicolas FLIPO, pour les discussions passionnées sur les interactions nappe-rivière. Merci à Myriam SCHMUTZ, pour sa vision géophysique des échanges nappe-rivière. Merci à Olivier ATTEIA, pour l'expertise qu'il m'a apporté sur la problématique du transport et les discussions très intéressantes sur les mécanismes de dispersion. Je pense également aux postdocs qui ont participé à ce projet et sans qui ce travail ne serait pas ce qu'il est. Merci à Abdelaziz FANZAR, Célestine DELBART et Rémi VALOIS. Ce fut un réel plaisir de travailler avec vous, et d'apprendre de vos spécialités respectives. Je tiens également à remercier les membres Suez Environnement avec qui j'ai eu plaisir à échanger et travailler. Merci à Xavier LITRICO qui a toujours

porté un regard attentif sur le déroulement de cette thèse. Je remercie également Mélodie CHAMBOLLE avec qui il a toujours été agréable d'échanger et de travailler. Merci à Michel FARGEOT, pour nous avoir partagé son expertise sur le champ captant de Thil-Gamarde et avoir su nous faciliter la réalisation des opérations nécessaires au bon déroulement du projet. Je tiens aussi à remercier l'ensemble du personnel de Suez Environnement travaillant sur le champ captant de Thil-Gamarde qui nous ont permis de mener à bien ce projet.

Je souhaiterais remercier l'ensemble du personnel de l'ENSEGID qui ont rendu la vie au laboratoire agréable. Tout d'abord mes co-bureaux : Hugo avec qui j'ai partagé mon bureau du premier jour jusqu'à l'impression du manuscrit. Merci pour son écoute, son soutien et les nombreuses discussions fort intéressantes, parfois scientifiques parfois pas du tout, autour d'un café mais aussi de quelques bières. Merci également aux autres co-bureaux de passage avec qui il a été agréable de discuter et d'échanger : Line, Mouloud, Léonard et Anita. Je tiens également à remercier les doctorants et post-doctorants qui ont également contribué à rendre mon séjour agréable : Clément pour les petites parties de foot improvisées de fin d'après-midi du mois d'août et les discussions de 18h30 toujours accompagnées de Rémi et d'Hugo. Merci à Morgan pour l'entraide mutuelle en fin de thèse. Merci à Elicia pour les échanges et conseils notamment sur la mise en oeuvre du null-space monte carlo. Merci également à Alex, Tamara, Jean, Nico, Mehdi, Elyess, Adrien, Adel, Kevins, Luca, Aurelie, Constance. J'aimerais remercier les membres du personnel qu'ils soient enseignant-chercheurs, ingénieurs, administratifs, pour leur soutien et leur aide et notamment François, Michel, Raphaël, Jean-Marie et Greg pour les bons moments partagés.

Dans un registre moins académique j'aimerais remercier mes amis, tout d'abord la bande des Montpelliérains : David, Manu, Marco, Max, Paul et Pauline un immense merci pour tous les moments inoubliables partagés, et ce depuis bien avant ces années de thèse. Je pense aussi à mes collègues et amis de Master qui s'en sont allés faire leur thèse de l'autre côté de l'Atlantique Raph et Nico et plus localement Clio et Thomas, nos trop rares retrouvailles ont toujours été un réel plaisir. Je pense également aux belles recontres faites ici et notamment à Aurelie merci pour les quelques relectures de dernière minute et les pastis Landais ! Brittany, pour tous les bons moments passés ensemble. Merci également à Antoine, pour les sorties durant son séjour à Bordeaux, et Emile pour les belles bouteilles partagées.

J'aimerais remercier mes parents qui m'ont permis d'avoir la curiosité

nécessaire, pour leur soutien et leur encouragement sur ces trois dernières années et bien avant, je leur doit beaucoup. Merci aussi à mes deux frères, Sylvain et Guillaume, pour tout ce qu'ils ont su m'apporter en tant que "grands" frères.

Et enfin, un merci un peu spécial à Clotilde pour son soutien sans faille, pour avoir toujours été à mon écoute mais aussi pour les précieuses relectures qu'elle a pu faire sur les parties en anglais comme en français. Ma reconnaissance envers toi s'étend bien au delà de ce travail de thèse.



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
1.1	Motivations . . . . .	1
1.2	Contexte scientifique . . . . .	2
1.3	Méthodologie . . . . .	2
1.4	Organisation du projet . . . . .	4
1.5	Structure du document . . . . .	4
<b>I</b>	<b>Caractérisation</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Échanges nappe-rivière à l'échelle intermédiaire</b>	<b>9</b>
2.1	Introduction . . . . .	9
2.2	Échanges nappe-rivière et échelle spatiale d'observation . . . . .	10
2.3	Méthodes de mesure des interactions nappe-rivière . . . . .	15
2.4	Cas de l'échelle intermédiaire . . . . .	18
2.5	Modélisation des échanges nappe-rivière . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Estimating River Conductance from Prior Information to Improve Surface-Subsurface Model Calibration</b>	<b>25</b>
3.1	Introduction . . . . .	27
3.2	The Approach . . . . .	29
3.3	Applications of the Methodology . . . . .	34
3.4	Sensitivity of the River Conductance to Hydrodynamic and Geometric Parameters . . . . .	36
3.5	Discussion . . . . .	39
3.6	The Software . . . . .	40
3.7	Conclusion . . . . .	40
3.8	Acknowledgments . . . . .	41
3.9	Appendix A : Validation of the Local Numerical Model . . . . .	41
<b>II</b>	<b>Conceptualisation</b>	<b>43</b>
<b>4</b>	<b>Échanges nappe-rivière à l'échelle intermédiaire : le champ captant de Thil-Gamarde</b>	<b>45</b>
4.1	Introduction . . . . .	45

---

4.2	Contexte général . . . . .	46
4.3	Présentation du champ captant . . . . .	49
4.4	Caractérisation et conceptualisation des écoulements et du transport . . . . .	55
<b>III</b>	<b>Modélisation et calibration</b>	<b>79</b>
<b>5</b>	<b>Construction du modèle d'échanges nappe-rivière à l'échelle intermédiaire</b>	<b>81</b>
5.1	Introduction . . . . .	81
5.2	Approche de modélisation : choix des modèles . . . . .	81
5.3	Plateforme de modélisation . . . . .	82
5.4	Modélisation de l'écoulement . . . . .	82
5.5	Modélisation du transport . . . . .	94
5.6	Discussion et perspectives . . . . .	96
<b>6</b>	<b>Parameter Estimation with Particle Tracking as a Surrogate Model for Advective-Dispersive Transport</b>	<b>99</b>
6.1	Introduction . . . . .	101
6.2	Approach . . . . .	102
6.3	Validation . . . . .	104
6.4	Discussion and Conclusions . . . . .	110
<b>7</b>	<b>Estimation des paramètres et quantification des incertitudes</b>	<b>113</b>
7.1	Introduction . . . . .	113
7.2	Estimation des paramètres dans les modèles hydrogéologiques . . . . .	113
7.3	Mise en œuvre de l'estimation des paramètres . . . . .	123
7.4	Résultats de l'estimation des paramètres . . . . .	129
7.5	Quantification des incertitudes . . . . .	142
<b>IV</b>	<b>Simulation</b>	<b>155</b>
<b>8</b>	<b>Apport de la modélisation des échanges nappe-rivière à la gestion du champ captant</b>	<b>157</b>
8.1	Introduction . . . . .	157
8.2	Caractérisation des échanges nappe-rivière . . . . .	157
8.3	Exemples d'application du modèle développé . . . . .	160
8.4	Discussion . . . . .	164
<b>V</b>	<b>Conclusions et perspectives</b>	<b>167</b>
<b>9</b>	<b>Conclusions</b>	<b>169</b>
9.1	Développements méthodologiques . . . . .	169
9.2	Résultats opérationnels . . . . .	170

---

9.3 Limites . . . . .	171
<b>10 Perspectives</b>	<b>173</b>
10.1 Perspectives de recherche . . . . .	173
10.2 Perspectives opérationnelles . . . . .	174
<b>Références</b>	<b>175</b>



# Chapitre 1

## Introduction générale

### 1.1 Motivations

De nombreux champs captants puisent leurs ressources en eau potable au sein du continuum surface-souterrain en zones urbaines ou péri-urbaines où les risques de pollutions accidentelle ou diffuse sont élevés (Derx et al., 2010; Doppler et al., 2007; Engeler et al., 2011; Kurtz et al., 2014; Loizeau, 2013). C'est le cas du champ captant de Thil-Gamarde (Gironde) qui alimente en eau la métropole de Bordeaux à hauteur d'environ 20% de ses besoins. On y exploite un système aquifère de sub-surface inter-connecté avec les eaux de surface. Le site a fait l'objet durant l'été 2011 d'une première alerte de pollution au perchlorate d'ammonium sur ses ouvrages AEP. Le cours d'eau qui traverse ce champ captant, la Jalle de Saint-Médard, est un des vecteurs avéré de cette pollution.

C'est dans ce contexte que la région Nouvelle-Aquitaine (ancienne région Aquitaine), en partenariat avec le LyRE de Suez-Environnement et le laboratoire de recherche Géoressources & Environnement, a mis en place le projet MHYQA-D'Eau (Modélisation HYdrogéologique intégrée surface - profondeur pour la gestion Quantitative et qualitative des ressources en eau en Aquitaine et le Développement durable). Ce projet a pour but de caractériser les échanges nappe-rivière à l'échelle du champ captant de Thil-Gamarde à travers la conceptualisation et la modélisation des écoulements et du transport en nappe, afin de mettre en place un outil permettant d'évaluer des scénarios alternatifs de gestion pour gérer et protéger la ressource en eau.

Au delà de ce cas d'étude sur la métropole bordelaise, les recherches menées dans le cadre de cette thèse s'inscrivent dans une démarche plus générale d'amélioration de la prise en compte des échanges nappe-rivière dans les modèles hydrogéologiques. Cette démarche s'étend de la conceptualisation à la simulation en passant par l'estimation des paramètres et la quantification des incertitudes paramétriques et prédictives. L'approche développée se veut répliquable à d'autres contextes et sites d'études où la modélisation des échanges nappe-rivière est un enjeu fort.

## 1.2 Contexte scientifique

Les eaux souterraines et les eaux de surface ne sont pas des objets isolés du cycle de l'eau, mais deux composantes inter-connectées d'une même ressource (Fleckenstein et al., 2010; Sophocleous, 2002). Ainsi, les impacts sur l'une de ces deux composantes affectent inévitablement l'autre, que ce soit qualitativement ou quantitativement (Winter, 1995).

Les ressources en eaux de surface et souterraines ont pourtant longtemps été étudiées et gérées séparément. Cependant, la pression anthropique exercée à l'heure actuelle sur les eaux de surface comme souterraines, associée au changement climatique, entraîne des problèmes de disponibilité et de qualité de la ressource en eau (de Marsily, 2009). C'est ce qui a conduit à la nécessité de gérer ces deux entités comme une ressource unique (Fleckenstein et al., 2010). Cette nouvelle perception a permis de faire évoluer la gestion de la ressource en eau des hydro-systèmes en apportant de nouveaux défis aux chercheurs et gestionnaires dans le but de préserver une gestion durable et qualitative de la ressource en eau.

Initié dans les années 60 (Tóth, 1999), ce n'est que depuis une vingtaine d'années que l'intérêt pour l'étude des interactions entre les eaux de surface et les eaux souterraines a considérablement augmenté, avec 3 articles majeurs marquant ce tournant : Winter (1999) ; Woessner (2000) ; Sophocleous (2002). De nombreuses méthodes de mesure des interactions nappe-rivière ont été développées (Kalbus et al., 2006; Mouhri et al., 2012) et l'utilisation de modèles comme interpolateur spatio-temporel a permis la compréhension des processus d'échanges sur différentes échelles spatiales et temporelles (Flipo, 2013). Néanmoins, de nombreux enjeux et questions persistent et constituent un domaine de recherche multidisciplinaire actif. La caractérisation des processus bio-géochimiques associés aux fonctions écologiques de l'interface nappe-rivière, et la capacité de cette interface à atténuer les pollutions en font partie (Fleckenstein et al., 2010). D'un point de vue quantitatif, l'intégration des rivières dans les modèles d'échange nappe-rivière en intégrant les hétérogénéités géologiques et les processus sur différentes échelles est un autre défi majeur (Fleckenstein et al., 2006; Flipo, 2013).

D'un point de vue appliqué, de nombreuses recherches ont été menées avec comme but la gestion qualitative ou quantitative de la ressource en eau du continuum surface-souterrain (Dujardin et al., 2014; Engeler et al., 2011; Goderniaux et al., 2009; Kurtz et al., 2014; Leaf et al., 2015; Peyrard et al., 2008) et notamment en France, où une forte proportion de l'eau potable consommée provient de nappes alluviales d'accompagnement en relation directe avec les entités de surfaces (Lalot, 2016; Lalot, 2014; Loizeau, 2013; Pryet et al., 2015b).

## 1.3 Méthodologie

Le souterrain est par nature difficilement accessible et analysable. Cela entraîne un manque d'information sur ses propriétés et son fonctionnement. La modélisa-

tion est souvent la meilleure option pour décrire le fonctionnement d'un système hydrogéologique ainsi que pour prédire les conséquences de scénarios prospectifs (Anderson et al., 2015). C'est dans cette optique qu'a été initié ce projet de thèse. La réalisation de cet objectif a permis de se poser certaines questions sur la conceptualisation, la modélisation, l'estimation des paramètres et la mise en pratique d'un modèle d'échange nappe-rivière à l'échelle intermédiaire [100 m - 10 km]. Les réponses à ces questions ont pu déboucher sur l'élaboration ou l'utilisation de méthodologies originales concernant la modélisation des interactions nappe-rivière à cette échelle.

Une modélisation des échanges nappe-rivière passe en partie par une intégration rigoureuse des eaux de surfaces au sein des modèles hydrogéologiques. A notre échelle de travail et jusqu'à l'échelle de l'hydrosystème, les eaux de surface sont très largement simulées au travers de modèle à conductance (type Cauchy) à partir du code de calcul MODFLOW (Ebel et al., 2009; McDonald and Harbaugh, 1988; Rosenberry and LaBaugh, 2008). L'amélioration de la simulation des échanges nappe-rivière à travers l'estimation de la valeur de conductance constitue un axe majeur de recherche (Anderson, 2005; Mehl and Hill, 2010; Morel-Seytoux, 2009; Morel-Seytoux et al., 2014; Rushton, 2007). Cependant, les méthodes proposées sont souvent trop simples pour fournir une valeur fiable de conductance ou alors trop complexes pour être utilisées par les modélisateurs. Une première partie des recherches consiste à développer une méthodologie visant à proposer un outil d'estimation de la conductance basé sur l'information a priori des paramètres physiques du système.

La réalisation de l'objectif opérationnel passe par la conceptualisation des écoulements et du transport nappe-rivière à l'échelle du site d'étude à travers des travaux de terrain. La traduction du modèle conceptuel établi, en modèle mathématique d'écoulement et de transport, est réalisé. L'estimation des paramètres par résolution du problème inverse, étape inhérente à la modélisation, est conduite avec l'aide de l'algorithme d'estimation des paramètres PEST++ (Welter et al., 2012). En dehors de l'estimation des paramètres classiquement réalisée vis-à-vis des observations de charges, les besoins de l'étude nécessitent une bonne simulation du transport nappe-rivière, caractérisé par des observations de rapports de mélange eau de surface - eau souterraine. Cependant, les simulations utilisant la résolution de l'équation d'advection - dispersion sur des modèles complexes sont souvent trop longues pour être utilisées dans le processus de calibration nécessitant plusieurs milliers d'appels de modèle (Carniato et al., 2015; Hill and Tiedeman, 2006). Une méthodologie a alors été développée pour simuler les rapports de mélanges entre les eaux de surface et les eaux souterraines à partir d'un modèle équivalent, rapide, de suivi de particules à partir du code de calcul MODPATH.

La diminution des problèmes liés à l'estimation des paramètres en modélisation hydrogéologique, notamment la non-unicité et l'incertitude de la solution, est un domaine de recherche actif (Zhou et al., 2014). Ces problématiques ont été considérées dans cette thèse en utilisant des techniques de régularisation mathématique largement employées (Doherty, 2003; Doherty and Skahill, 2006), mais

également en utilisant des observations de terrain, telles que les cartographies de résistivité électrique afin de tendre vers une solution unique des paramètres hydrodynamiques calibrés. Une méthodologie de quantification de l'incertitude paramétrique et prédictive est mise en place à partir de l'analyse du *Null-Space Monte Carlo* (Tonkin and Doherty, 2009).

L'aboutissement de ces recherches consiste en la proposition d'un modèle d'écoulement et de transport, permettant de tester des scénarios de gestion alternatifs en vue de protéger la ressource en eau souterraine du vecteur de contaminations rivière. Une méthodologie est mise en place pour tester des scénarios alternatifs de gestion et prendre en compte l'incertitude associée à chacun des scénarios est envisagée.

### 1.4 Organisation du projet

Cette thèse s'inscrit dans le cadre du projet MHYQAD'Eau dont elle fixe les limites du premier volet (octobre 2013 - octobre 2016). Trois post-doctorants ont également pris part au projet : Celestine Delbart de septembre 2014 à septembre 2016 sur l'axe géo-chimie du projet, dont les travaux ont portés sur l'acquisition de données chimiques pour : i) caractériser les rapports de mélange surface - souterrain aux points d'observation ; ii) décrire la dégradation biologique des perchlorates dans les sédiments du lit de la rivière. Abdelaziz Fanzar de septembre 2014 à septembre 2015 sur l'axe numérique du projet au travers du développement et de la programmation d'outils numériques. Rémi Valois de septembre 2015 à septembre 2016 sur l'axe géophysique du projet dont les travaux ont portés sur : i) l'acquisition de données électro-magnétiques (EM 31) et de résistivité électrique pour caractériser les structures géologiques de la zone d'étude ; ii) l'utilisation de la méthode du potentiel spontané (PS) pour caractériser le sens d'échange nappe-rivière.

Le projet et la thèse sont globalement divisés en plusieurs phases chronologiques : la première année a majoritairement été consacrée aux travaux de terrain (instrumentation, acquisition, traitement des données) et à l'étude bibliographique des échanges nappe - rivière ; la deuxième année a servi au développement de l'outil de calcul du coefficient rivière en parallèle des travaux de terrain et de la construction du modèle d'écoulement et de transport de la zone d'étude ; la troisième année a servi à la phase modélisation, estimation des paramètres et la gestion des incertitudes ainsi qu'à la rédaction du manuscrit de thèse.

### 1.5 Structure du document

Ce document est divisé en quatre parties principales : I) **Caractérisation**, II) **Conceptualisation**, III) **Modélisation et calibration** et IV) **Simulation**.

La Partie I vise à établir un état de l'art des échanges nappe - rivière à l'échelle intermédiaire et à améliorer l'intégration des rivières au sein des modèles hydro-géologiques. Pour cela le chapitre 2 est axé sur la caractérisation de ces échanges,

la description des méthodes de mesure et la modélisation des échanges nappe - rivière. Le chapitre 3 propose une approche pour estimer a priori du coefficient rivière visant à améliorer la calibration des modèles d'échanges nappe - rivière. Ce chapitre correspond à un article accepté par la revue *Groundwater*. La Partie II vise à décrire le site d'étude et à établir le modèle conceptuel des écoulements et du transport (Chapitre 4). Cette partie est principalement basée sur les travaux de terrain réalisés au cours de cette thèse.

La Partie III est axée sur la construction du modèle d'échange nappe - rivière (Chapitre 5) à travers la modélisation des écoulements et du transport à partir d'une méthode de suivi de particule développée (cette méthode est décrite et validée dans le chapitre 6 sous la forme d'un article). L'estimation des paramètres et la quantification des incertitudes paramétriques et prédictives est en suite décrite (Chapitre 7). La Partie IV permet d'illustrer les possibilités de l'outil développé pour le test de scénarios de gestion prédictifs, et la quantification des incertitudes associées (Chapitre 8).

Les conclusions générales de cette thèse ainsi que les perspectives sont finalement présentées (Partie V).



Première partie  
Caractérisation



# Chapitre 2

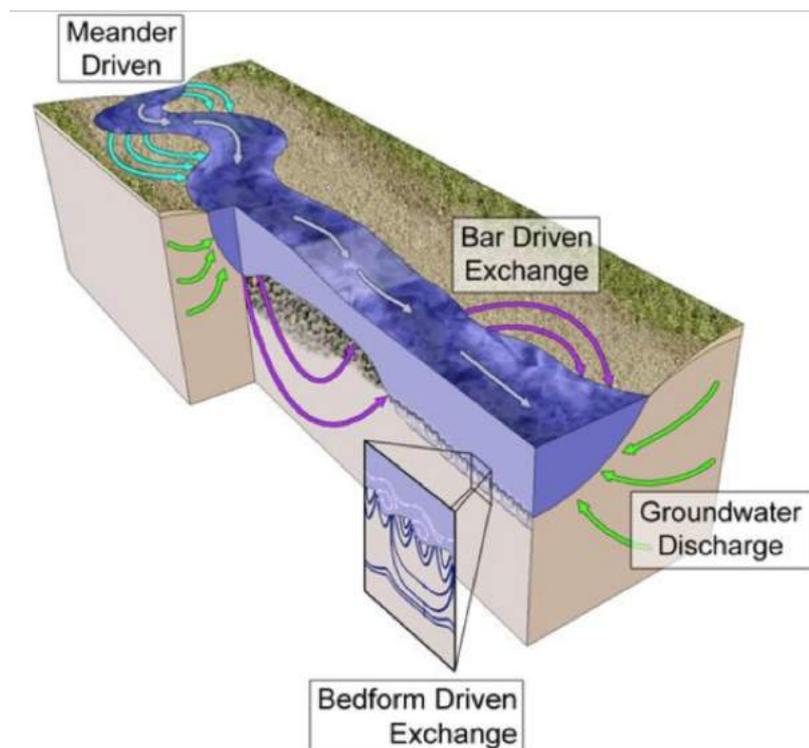
## Échanges nappe-rivière à l'échelle intermédiaire

### 2.1 Introduction

L'intérêt porté pour l'étude des interactions nappe-rivière est croissant sur les dernières décennies (Fleckenstein et al., 2010). Les travaux menés par les écologues, géologues et hydro(géo)logues ont permis une approche multidisciplinaire dans l'étude des interactions nappe-rivière avec une vision d'ensemble des processus entrants en jeu. L'interface nappe-rivière peut être considérée comme un objet multi-échelle dont les processus et les moyens d'étude varient selon l'échelle spatiale et temporelle d'observation (Flipo et al., 2014; Kalbus et al., 2006). À l'échelle locale [0 m - 100 m], l'interface nappe-rivière est considérée comme une zone, constituée par une couche de sédiments saturée en eau, située autour du lit de la rivière (Kalbus et al., 2006), appelée **zone hyporhéique** (ZH) (Schwoerbel, 1961), alors qu'à l'échelle de **l'hydrosystème** [10 km - 100 km] l'interface nappe-rivière est souvent constituée d'une plaine alluviale. La perception des processus associés à ces deux échelles diffère spatio-temporellement, du changement de pression à l'échelle infra-métrique à l'origine des échanges hyporhéiques rapides dans le premier cas, à des écoulements plus lents d'eau à l'échelle kilométrique répondant à des gradients de charge régionaux pour le second (Figure 2.1). Les flux ainsi échangés au travers de l'interface nappe-rivière répondent à des gradients d'ampleur centimétrique à kilométrique sur des temps allant de la seconde aux mois (Datry et al., 2008). De plus, la distribution des échanges est souvent fortement irrégulière dans l'espace et dans le temps avec des débits très variables le long et en travers du cours d'eau (Sophocleous, 2002).

Aux interfaces entre ces deux échelles, se situe **l'échelle intermédiaire** [100 m - 10 km] dont les processus régissant les échanges englobent à la fois des phénomènes locaux et régionaux.

Ce chapitre vise à caractériser les échanges nappe-rivière en fonction de ces trois échelles spatiales d'observation : de la **zone hyporhéique** à **l'hydrosystème** en passant par l'échelle d'intérêt pour ce travail, **l'échelle intermédiaire**. Un inventaire non exhaustif des méthodes de mesure des échanges nappe-rivière sera



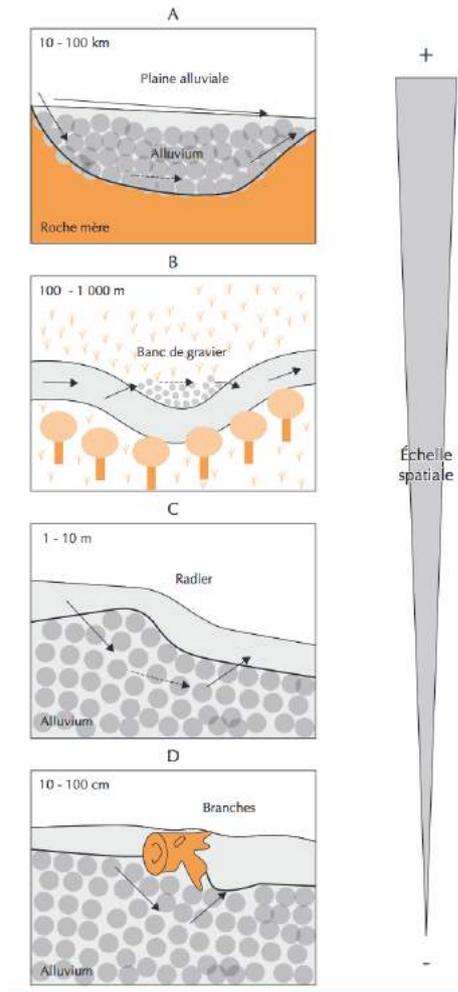
**Figure 2.1** : Flux échangés nappe-rivière à différentes échelles. Flux de type hyporhéiques en bleu et violet et régionaux/intermédiaires en vert (Stonedahl et al., 2010)

réalisé. Finalement, la description des méthodes d'intégration des rivières dans les modèles hydrogéologiques d'écoulement sera faite.

## 2.2 Échanges nappe-rivière et échelle spatiale d'observation

### 2.2.1 A l'échelle locale : la Zone Hyporhéique (ZH)

La ZH est un terme employé dans un premier temps par les écologues afin de désigner un habitat écologique où les eaux de surface et les eaux souterraines se mélangent (Datry et al., 2008). D'un point de vue hydrologique, la ZH est la zone où les eaux de surface s'infiltrent dans la nappe, latéralement et en dessous du lit de la rivière, et reviennent à la surface plus en aval (Harvey and Wagner, 2000). La ZH peut faire entre quelques cm d'épaisseur, et jusqu'à plus de 100 m d'épaisseur autour du cours d'eau (Ellis et al., 2007). Un principe simple implique que : tout obstacle à l'écoulement du flux de surface provoque, si la perméabilité du lit de la rivière le permet, des échanges à travers la ZH, l'amplitude des mouvements dépendant en partie de la taille de l'obstacle. Ces échanges peuvent avoir lieu sur différentes échelles spatiales : de l'échelle intermédiaire, où la sinuosité du cours d'eau joue un rôle dans les échanges hyporhéiques, à l'échelle locale



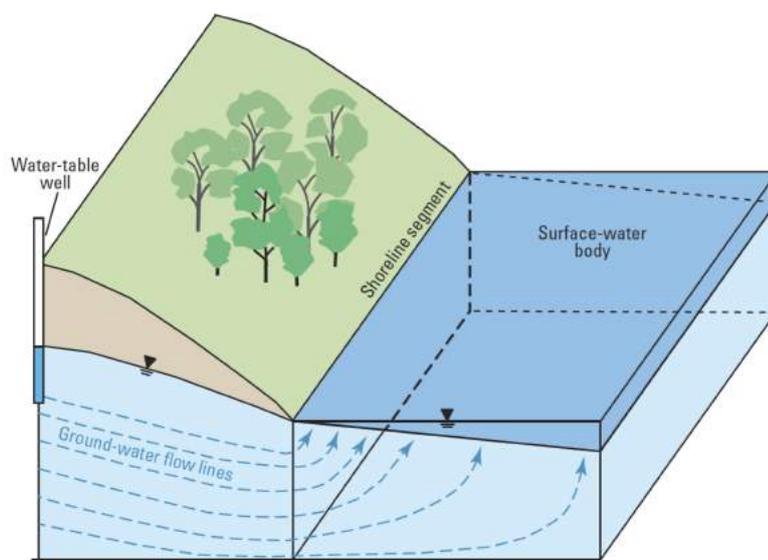
**Figure 2.2 :** Les échanges hyporhéiques à différentes échelles spatiales Datry et al. (2008)

par la présence d'un tronc d'arbre, ou d'un radier/mouille (Datry et al., 2008) (Figure. 2.2).

D'après Hester and Doyle (2008) les échanges hyporhéiques obéissent principalement aux mécanismes suivants :

- 1. les flux dus au changement local de pente du cours d'eau et induits par le gradient de charge créé ;
- 2. les flux dus aux remous, créés par le gradient de charge formé par l'afflux d'eau à la suite d'un obstacle dans le fond de la rivière (tronc d'arbre, débris...);
- 3. les flux dus aux pertes de charge.

Le passage temporaire d'eau dans l'aquifère a d'importantes conséquences d'un point de vue qualitatif de par les processus bio-géochimiques qui s'y produisent (Fuller and Harvey, 2000; Soulsby et al., 2001). L'effet dépolluant de la ZH a éga-



**Figure 2.3 :** Condition hydraulique classique rencontrée à proximité d’une rivière, la convergence des flux de l’aquifère vers la rivière permet l’échange, d’après (Rosenberry and LaBaugh, 2008)

lement été mis en avant (Gandy et al., 2007), et notamment sur la dégradation des perchlorates (Célestine Delbart, communication personnelle et expérimentation). Cependant d’un point de vue quantitatif, au delà d’une certaine échelle, ces échanges n’ont pas d’effet. La bibliographie menée à ce sujet montre d’ailleurs que généralement, l’étude de la ZH est réalisée dans l’objectif d’étudier les procédés bio-géochimiques.

Il convient de définir deux types de flux nappe-rivière : i) le **flux total** échangé entre la nappe et la rivière qui correspond à la somme algébrique des flux entrants ou sortants de l’interface nappe-rivière et ii) le **flux net** qui correspond au flux échangé entre la rivière et l’aquifère excluant les flux localisés dans la ZH voués à un circuit entre la rivière et la ZH. Lorsque l’on élargit l’échelle d’étude des échanges nappe-rivière au delà de la ZH, la résultante des flux nappe-rivière tend vers le flux net, qui est lui contrôlé par des paramètres régionaux (recharge de la nappe par exemple), et revêt un fort intérêt sur le quantitatif.

En dehors des flux uniquement contenus dans la ZH, c’est également à l’échelle locale que le flux net nappe-rivière est directement échangé au travers de l’interface (Figure 2.3). Lorsque l’on considère une coupe transversale à la rivière, on réalise que l’arrangement des lignes de courant est convergent / divergent (sauf dans le cas d’une rivière complètement pénétrante). Ces flux, contrôlés par les paramètres régionaux sont déterminants pour l’étude quantitative du flux net nappe-rivière (Morel-Seytoux et al., 2014).

### 2.2.2 A l'échelle régionale : l'hydrosystème

A l'échelle de l'hydrosystème, l'étude des échanges nappe-rivière est placée dans un contexte général de bassin versant (Mouhri et al., 2012), ce qui implique souvent la non prise en compte de processus locaux, comme par exemple les échanges hyporhéiques, qui n'ont plus d'effet quantitatif à cette échelle. On considère alors que les échanges nappe-rivière répondent principalement au gradient hydraulique régional et aux propriétés hydrodynamiques du milieu (conductivité hydraulique) (Sophocleous, 2002; Winter, 1995). La direction des échanges évolue en fonction de la différence de charge hydraulique entre la rivière et la nappe, et les volumes échangés dépendent de la configuration géométrique et des propriétés hydrodynamiques de l'aquifère et du lit de la rivière (Rushton, 2007; Sophocleous, 2002). A cette échelle, estimer les échanges nappe-rivière implique la prise en compte de divers processus aux amplitudes temporelles variables; horaire à journalier pour les écoulements de surface, annuel à décennale pour la recharge, et décennal à centennal pour les écoulements souterrains (Flipo et al., 2012). La modélisation numérique doit alors souvent être employée comme interpolateur spatio-temporel (Mouhri et al., 2013).

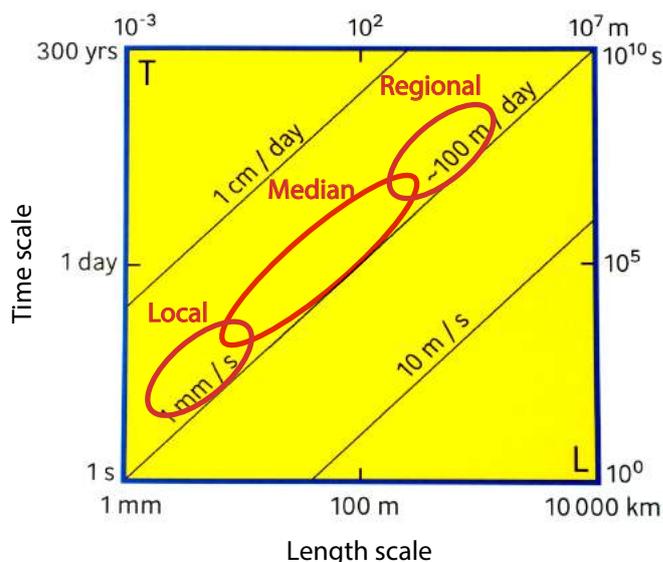
Les études portant sur les échanges nappe-rivière à l'échelle de l'hydrosystème sont plutôt rares à l'heure actuelle, et sont largement minoritaires sur l'ensemble des études sur les échanges nappe-rivière (Flipo, 2013). Parmi les études existantes, on peut citer Kikuchi et al. (2012) qui utilisent un dispositif multi-échelles intégrant les trois échelles spatiales d'analyse (locale, intermédiaire et régionale) pour caractériser les échanges nappe-rivière d'un bassin versant. Cette approche permet dans un premier temps de déterminer des zones d'échange à l'échelle du bassin versant (régional) pour ensuite effectuer des mesures à l'échelle de la section de rivière (intermédiaire), puis à l'échelle locale. Ce type d'approche multidisciplinaire et multi-échelle permet de limiter les erreurs d'estimation (Fleckenstein et al., 2010; Sophocleous, 2002).

D'un point de vue de la modélisation numérique les travaux cherchant à quantifier les échanges nappe-rivière à l'échelle de l'hydrosystème sont également rares (Labarthe, 2016; Leaf et al., 2015; Monteil, 2011; Pryet et al., 2015b; Saleh et al., 2011; Thierion et al., 2012), cela est sans doute dû au manque de données disponibles à cette échelle et des difficultés à mettre en œuvre de tels modèles (Pryet et al., 2015b).

Quand les études de la ZH sont généralement réalisées dans un but de compréhension et de protection des écosystèmes s'y développant, l'étude des échanges nappe-rivière à l'échelle régionale a majoritairement pour but la gestion de la ressource en eau d'un point de vue quantitatif ou qualitatif (Thierion et al., 2012).

### 2.2.3 L'échelle intermédiaire

Suite à la présentation de l'échelle locale et régionale on peut distinguer : i) les échanges hyporhéiques, voués à un passage temporaire entre la sub-surface et la rivière, et produits par le régime d'écoulement, les irrégularités morphologiques



**Figure 2.4 :** Processus d'échange nappe-rivière dans le temps et l'espace. Diagramme de Stommel modifié d'après (Blosch et al., 2015)

du lit de la rivière, les méandres, ou encore des obstacles présents sur le lit de la rivière, ii) les échanges à plus large échelle qui répondent au gradient hydraulique entre la nappe et la rivière (Figure 2.1).

Se situant entre les frontières des échelles locales et régionales, l'échelle intermédiaire [100 - 10km] englobe des processus aux fréquences temporelles et aux étendues spatiales très différentes (Figure 2.4). Par exemple, la prise en compte des processus hyporhéiques, qui est fondamentale dans l'étude et la modélisation de l'interface nappe-rivière à l'échelle locale, n'est pas forcément à négliger à l'échelle intermédiaire. Selon leurs étendues, les échanges hyporhéiques peuvent influencer sur les écoulements et le transport dans un périmètre proche de la rivière (Datry et al., 2008), comme dans le cas d'un méandre ou encore d'un seuil. De l'autre côté, les processus régissant les échanges nappe-rivière à l'échelle régionale sont également fondamentaux à l'échelle intermédiaire. Les gradients hydrauliques régionaux et la structure géologique générale vont directement guider le sens et l'intensité des échanges à l'échelle intermédiaire (Sophocleous, 2002; Winter, 1995). Cette échelle d'étude répond donc à certains processus locaux comme régionaux, spatialement restreints comme étendus et temporellement rapides comme très lents. Bien que plutôt rare comparé à l'échelle locale, il existe un certain nombre d'études sur les échanges nappe-rivière à l'échelle intermédiaire (Doppler et al., 2007; Dujardin et al., 2014; Engeler et al., 2011; Hunt et al., 2006; Loizeau, 2013). Généralement traités sous l'angle de la modélisation, ces études utilisent des mesures locales de charges (Doppler et al., 2007; Loizeau, 2013), température (Dujardin et al., 2014; Engeler et al., 2011) pour calibrer un modèle numérique à l'échelle intermédiaire. Le but étant souvent la nécessité d'utiliser différents types de données

pour limiter les erreurs d'estimations (Fleckenstein et al., 2010; Hunt et al., 2006; Sophocleous, 2002)

## 2.3 Méthodes de mesure des interactions nappe-rivière

De part la forte variabilité spatio-temporelle des processus entrant en jeu, les moyens d'étude de l'interface nappe-rivière vont varier selon les objectifs à atteindre (Kalbus et al., 2006).

On peut classer les méthodes d'étude de l'interface nappe-rivière en deux grandes parties en fonction de l'échelle d'étude : d'un coté les méthodes étudiant les processus à l'échelle locale de la ZH (flux total) et d'un autre coté l'étude à plus large échelle, s'intéressant au flux net. Dans le premier cas, les méthodes sont généralement liées à l'étude des transferts bio-géochimiques à des fins écologiques (Anibas et al., 2011; Cardenas and Wilson, 2007a; Schmidt et al., 2007) alors que dans le deuxième cas les méthodes ont plus souvent un objectif quantitatif lié à la gestion de la ressource en eau (Doppler et al., 2007; Kikuchi et al., 2012). On peut également différencier les méthodes qui cherchent à identifier le sens des échanges, et celles qui cherchent à identifier leur intensités.

Un tour d'horizon des méthodes les plus couramment utilisées est établi ici, l'exhaustivité n'étant pas l'objectif de cette section, le lecteur peut se rapporter à des revues plus détaillées (e.g Kalbus et al. (2006); Mouhri et al. (2012))

### 2.3.1 Mesure directe du flux d'eau

Les mesures directes du flux de l'eau sont généralement basées sur l'utilisation d'un capteur d'exfiltration (*seepage meters*) dont les premiers ont été proposés par Lee (1977). Cet instrument consiste en un cylindre, de quelques dizaines de centimètres de diamètre, dont une des extrémités est surplombée d'une poche, et l'autre extrémité du cylindre est enfoncée dans les sédiments du lit de la rivière. Le flux d'eau de la nappe vers la rivière est collecté dans la poche. Le débit échangé est ensuite déduit à partir du temps de mesure et de la section du cylindre. Dans le cas d'échange de la rivière vers la nappe un volume d'eau connu peut être introduit dans le sac plastique et le volume perdu peut par la suite être déduit. Bien que simple d'utilisation, et encore très utilisée (McCallum et al., 2012; Rosenberry and Pitlick, 2009) les performances de cette méthode sont très discutées du fait de la modification de la charge hydraulique dans le sac plastique due au débit s'écoulant du cylindre (Murdoch and Kelly, 2003), il est également difficile de faire la part des choses entre flux net et flux total avec les débits provenant des échanges nappe-rivière, les échanges hyporhéiques et les re-circulations d'eau (Kalbus et al., 2006). Il y a également un problème de représentativité spatiale, du aux fortes hétérogénéités du lit de la rivière.

### 2.3.2 Méthode des traceurs thermiques

Le contraste de température entre les eaux de surface et les eaux souterraines peut être utilisé pour caractériser et quantifier les échanges nappe-rivière. De manière générale la température de l'eau souterraine est relativement stable au cours de l'année. La température de l'eau de surface, au contraire, varie à l'échelle journalière et saisonnière. Le transfert d'énergie thermique dans les sédiments répond aux mécanismes d'advection-dispersion (Mouhri et al., 2013). En l'absence d'effet de densité il est décrit par la même équation d'advection-dispersion que pour le transport de soluté en milieu poreux. Les méthodes thermiques sont robustes et relativement bon marché, elles permettent de connaître rapidement et facilement les zones de recharge ou de perte dans le lit de la rivière avec une forte résolution spatiale. Cette méthode est très utilisée dans l'étude des flux d'eau à travers la ZH pour caractériser les variations spatiales et temporelles de flux d'eau échangé (Anibas et al., 2011; Fleckenstein et al., 2010; Mouhri et al., 2013; Schmidt et al., 2007). Cependant, l'atténuation rapide du signal thermique en fonction de la distance avec la rivière (Mouhri et al., 2013) rend difficile l'utilisation de cette méthode pour la quantification du flux net de la rivière vers la nappe.

### 2.3.3 Méthodes basées sur la loi de Darcy

Ces méthodes sont basées sur la loi de Darcy, régissant les écoulements au sein des milieux poreux :

$$Q = K A i \quad (2.1)$$

où  $Q$  [ $L^3 T^{-1}$ ] est le débit nappe-rivière échangé,  $K$  [ $L T^{-1}$ ] la conductivité hydraulique,  $A$  [ $L^2$ ] l'aire de la section considérée,  $i$  [-] le gradient hydraulique entre le puits d'observation et la rivière.

La mesure du niveau d'eau en un point de la nappe (piézomètre) proche rivière, permet de déduire la direction et le flux entre le point mesuré et la rivière. Cependant cette méthode pose plusieurs problèmes : i) elle fait l'hypothèse de ligne de courant strictement verticales (hypothèse de Dupuit–Forchheimer) et ne prend donc pas en compte les flux convergent / divergeant autour de la rivière (Figure 2.3), ii) la difficulté d'obtenir la conductivité hydraulique équivalente entre le puits d'observation et la rivière. La représentativité de cette méthode varie en fonction de la distance entre le puits et la rivière. Noorduijn et al. (2014) montrent en effet que la représentativité du débit d'échange estimé, sur la longueur de rivière, est approximativement égale à la distance entre la rivière et le piézomètre. Pour la composante verticale du flux souterrain, qui est particulièrement importante dans l'étude des interactions nappe-rivière, un système dit en "flûte de pan", constitué de plusieurs piézomètres installés cote à cote mais à des profondeurs différentes, doit être envisagé (Kalbus et al., 2006).

En pratique, l'équipement conjoint de piézomètres et de points en rivière, avec des sondes de pression, permet d'obtenir des mesures de charge hydraulique ponc-

tuelle dans la nappe et dans la rivière. Facile et rapide à mettre en place cette méthode permet le suivi temporel des fluctuations de niveau en nappe et en rivière.

On peut également citer les méthodes "classiquement" utilisées en hydrogéologie pour estimer la conductivité hydraulique en nappe, avec les essais de nappe, l'analyse granulométrique, mais également les mesures de conductivité hydraulique du lit de la rivière, où Cheng et al. (2011) proposent une méthode basée sur la construction d'un perméamètre à enfoncer verticalement ou horizontalement dans les sédiments du lit de la rivière pour en déduire la conductivité hydraulique verticale ou horizontale.

L'utilisation de ces méthodes répartie en plusieurs points de l'espace permet d'obtenir une idée du sens, de la dynamique et de l'intensité des échanges nappe-rivière. La difficulté réside ensuite dans la spatialisation des mesures effectuées.

### **2.3.4 Jaugeage différentiel**

Le principe de cette méthode est de mesurer le débit sur différentes sections du cours d'eau étudié et d'estimer ainsi les volumes d'eau perdus ou gagnés entre deux sections de mesure par la différence de débit mesurée. Cette méthode est parfois couplée avec une injection de traceurs entre deux sections jaugées (Harvey and Wagner, 2000). Pour cette méthode, les volumes échangés entre la nappe et la rivière doivent être significativement supérieurs à l'erreur de mesure sur le débit de la rivière, ce qui contraint cette méthode à une résolution spatiale élevée, de l'ordre du kilomètre (Kikuchi et al., 2012).

### **2.3.5 Méthodes hydro-chimiques**

Diverses méthodes chimiques sont également utilisées pour l'étude des échanges nappe-rivière, tels que les traceurs environnementaux et artificiels.

Avec l'étude des traceurs environnementaux (éléments majeurs, isotopes), les contrastes de concentration d'un élément donné entre les eaux de surface et les eaux souterraines sont utilisés comme traceurs des échanges nappe-rivière. Les traceurs environnementaux sont utilisés depuis plusieurs décennies dans l'étude des échanges nappe-rivière (Cook, 2013). L'avantage des traceurs environnementaux est qu'ils peuvent potentiellement apporter des informations sur la distribution spatiale des échanges nappe-rivière à large échelle spatiale (Kimball et al., 2001).

Les essais de traçage sont également utilisés dans l'étude de l'interface nappe-rivière, l'injection d'un traceur artificiel en un point de la nappe ou de la rivière est réalisée, par la suite un suivi dans le temps de sa réception est mis en place sur plusieurs points de l'espace en nappe et en rivière. Les traceurs artificiels fournissent des informations sur les vitesses d'écoulement dans la nappe, les cinétiques de dispersion dans l'aquifère, et sur le degré de connexion hydraulique avec le cours d'eau (Mouhri et al., 2012).

### 2.3.6 Méthodes Géophysiques

Les méthodes géophysiques classiquement utilisées pour l'étude des échanges nappe-rivière ont pour objectif de caractériser la structure géologique et les possibles connectivités entre la rivière et le substratum. Les méthodes géophysiques de cartographie de la résistivité électrique permettent de mettre à jour les intrusions d'eau (peu minéralisée) dans l'aquifère, mais difficilement le contraire. Ces mêmes méthodes peuvent être utilisées pour la cartographie géologique de l'interface, et en particulier l'identification de milieux argileux, peu conducteurs d'un point de vue hydraulique (Binley et al., 2015).

Par exemple Cardenas and Markowski (2010a) utilisent la méthode géoélectrique de résistivité électrique pour cartographier les zones d'échanges hyporhéiques le long d'un cours d'eau.

Dans de cette thèse nous avons participé au développement d'une méthodologie pour caractériser le sens d'échange nappe-rivière à partir de mesure de potentiel spontané (PS) (en Annexe). Le PS est sensible aux flux d'eau souterrains (vitesse de Darcy). A travers l'étude d'un modèle conceptuel couplé PS et écoulement 2D vertical traversant une rivière, les résultats ont montré que l'aspect du profil PS renseigne sur le sens d'échange nappe-rivière. Cette méthode a été appliquée sur un transect de rivière du site d'étude. La modélisation inverse du profil PS acquis a permis de déterminer le sens d'échange entre la nappe et la rivière. Le PS est donc une méthode non destructive qui permet d'obtenir le sens d'échange nappe-rivière.

## 2.4 Cas de l'échelle intermédiaire

La plupart des méthodes d'étude des échanges nappe-rivière présentées dans la section précédente sont représentatives d'un site local, et ne permettent pas, à elles seules, de quantifier les échanges nappe-rivière le long d'un cours d'eau, ce qui demande alors une approche pluridisciplinaire (Mouhri et al., 2013; Sophocleous, 2002; Winter, 1995; Woessner, 2000) et multi-échelle (Scanlon et al., 2002).

Se plaçant à l'interface entre deux échelles, l'étude à l'échelle intermédiaire des échanges nappe-rivière doit faire face aux limitations de l'étude locale comme régionale. En effet, les méthodes locales (mesures directes du flux d'eau, thermiques) sont difficilement applicables sur des portions de rivière étendues et ne s'intéressent qu'aux échanges concentrés dans la ZH quand l'étude de l'échelle intermédiaire s'intéresse aussi et surtout à l'identification du flux net. De l'autre coté les méthodes applicables à très large échelle, sont d'une part limitée (Mouhri et al., 2012) et d'autre part souvent trop étendues (jaugeage différentiel, analyse de l'hydrogramme) pour faire face aux besoins rencontrés à l'échelle intermédiaire. Cette revue bibliographique des méthodes de mesure des interactions nappe-rivière met en avant la difficulté de mesurer ces échanges à l'échelle intermédiaire au regard des phénomènes à caractériser.

Ainsi les méthodes adaptées à l'échelle intermédiaire sont restreintes (Kalbus et al., 2006; Mouhri et al., 2012) :

Méthodes	Echelle spatiale			Echelle temporelle		Coût	Avantages	Inconvénients
	Locale Ponctuelle	Médiane Plaine alluviale	Régionale Bassin versant	Ponctuelle	Pluriannuelle			
<b>Compteur d'exfiltration (Seepage meter)</b>	●	■		●		- - -	Mesure directe de flux Dispositif simple Méthode Semi-quantitative	Fortes incertitudes Mesure ponctuelle Inapplicable sur substrat dur
<b>Jaugeage différentiel</b>	●	■		●	■	- - -	Mesure simple et rapide bilans de fuite en rivière	Mesure ponctuelle Echanges non localisés dépend des points de jaugeage
<b>Hydrologiques</b>								
Basée sur la loi Darcy	●	■		●	■	- à +	Connaissance des niveaux d'eau en rivière et aquifère	Difficultés d'estimation des flux à partir de la conductivité hydraulique et de la perméabilité
Gradient hydraulique	●	■		●	■	- à +	identification des processus et du sens d'écoulement	Mesures ponctuelles difficile à interpoler spatialement
Conductivité hydraulique	●	■		●	■	- à +		
<b>Analyse de l'hydrogramme</b>	●		■	■	■	- à +	Estimation des contributions de la nappe et de la rivière et de la variabilité des échanges temporellement	Intègre l'ensemble des processus amont Nécessite des traçages et datations de masse d'eau
<b>Hydro-Chimiques</b>								
les éléments majeurs		■	■	●	■	- à +	Calcul des vitesses et des temps de résidence, des prospérités du milieu (transmissivité), Compréhension du mélange des eaux	Tauxeur peut être influencé par les processus de dégradation, d'adsorption etc. Mesure ponctuelle et instantanée
les isotopes		■	■	●	■	- à +		
les traceurs naturels & artificiels		■	■	●	■	- à +		
<b>Méthodes biologiques</b>	●	■		●		- à +	Variations saisonnières du flux. Localisation de point d'échanges et du sens du flux	Ponctuelle spatialement Uniquement qualitatif Dépendent de l'observateur
<b>Géophysiques</b>								
Thermique	●			●	■	- à +	Quantification de flux à haute résolution et avec précision Cartographie des échange le long de la rivière	Calibration assez lourde Inversion des températures en flux Mesures ponctuelles en 1D
géophysique	●	■		●		- à +	Rapides et à large échelle Définition de la structure spatiale et de la connectivité cours d'eau/ substrat	Méthodes indirectes Calibration par d'autre méthode (carottage, géochimie etc.) approche statique et qualitative
<b>Modélisation</b>		■	■		■	- à +	Estimation de la variabilité spatiale et temporelle des flux Visualisation 3D des flux possible Test de scénari	Nécessite une connaissance préalable des processus Mise en oeuvre et validation assez lourdes

Figure 2.5 : Synthèse des méthodes d'étude des interactions nappe-rivière d'après Kalbus et al. (2006) modifié par Mouhri et al. (2012)

i) les méthodes basées sur la loi de Darcy. Ces méthodes constituent une information, certes spatialement ponctuelle, mais cruciale concernant le sens, l'intensité et la dynamique temporelle des échanges nappe-rivière, ainsi que sur les propriétés hydrodynamiques du sous sol ;

ii) les méthodes géophysiques, informant sur la structure du sous sol, ainsi que sur le sens d'échange nappe - rivière (PS). Elles ne fournissent cependant qu'une information ponctuelle dans le temps et ne sont valables que sous certaines conditions (par exemple rivière en perte pour la cartographie de résistivité électrique) ;

iii) les méthodes hydro-chimiques sont quant à elles bien adaptées à l'étude de l'échelle intermédiaire, bien qu'elles ne fournissent souvent qu'une information ponctuelle dans le temps et l'espace.

A l'échelle intermédiaire, comme régionale, l'utilisation de méthode de mesure indirecte des échanges nappe-rivière est fondamentale bien que n'apportant une information souvent que ponctuelle dans l'espace et dans le temps. De ce fait, les techniques de modélisation, en complément des méthodes de mesure, vont permettre leur interpolation spatio-temporelle.

### 2.5 Modélisation des échanges nappe-rivière

Comme décrit dans les sections précédentes, l'étude des interfaces nappe-rivière nécessite de conjuguer des mesures de terrain à l'emploi de modèles numériques. Un modèle est une représentation simplifiée de la complexité du milieu naturel (Anderson et al., 2015). Pour cela le modèle calcule l'évolution de variables inconnues, les sorties, en fonction de variables d'entrées connues et des différents paramètres du système. Seuls les modèles mécanistiques seront traités dans ce travail, très majoritairement utilisés dans la modélisation des échanges nappe-rivière (Flipo et al., 2014). La modélisation passe alors par la résolution des équations gouvernant les processus (écoulement, transport, *etc*) à l'échelle du domaine, limitées par des conditions limites spécifiant la charge ou le flux. Pour les modèles transitoires un état initial indiquant les charges, concentrations à l'échelle du domaine étudié est spécifié.

Les modèles demandent une forte simplification du milieu étudié. Selon les processus à modéliser, certaines entités des modèles sont souvent simplifiées et représentées par des conditions limites. Souvent cela est bénéfique pour simplifier le problème tout en conservant un niveau acceptable de compréhension et pour des raisons pratiques de capacité numérique à résoudre le problème (Furman, 2008). Dans les modèles hydrogéologiques les cours d'eau sont ainsi représentés à travers des conditions limites, de ce fait, certains processus de surface (hydraulique du cours d'eau) ou de subsurface (échanges hyporhéiques) peuvent être modélisés de manière implicite en prenant en compte la résultante de leur effet à plus grande échelle.

Les cours d'eau peuvent être intégrés au modèle hydrogéologique par deux types de conditions limites : i) par continuité de pression et de flux à l'interface, avec

une condition de type Dirichlet (Condition de type-II à charge fixe), ii) par un modèle à conductance avec une condition de Cauchy (condition mixte de type-III). On présente dans les deux sections suivantes les caractéristiques, intérêts et limites de ces deux types de conditions limites.

### 2.5.1 Condition de type Dirichlet

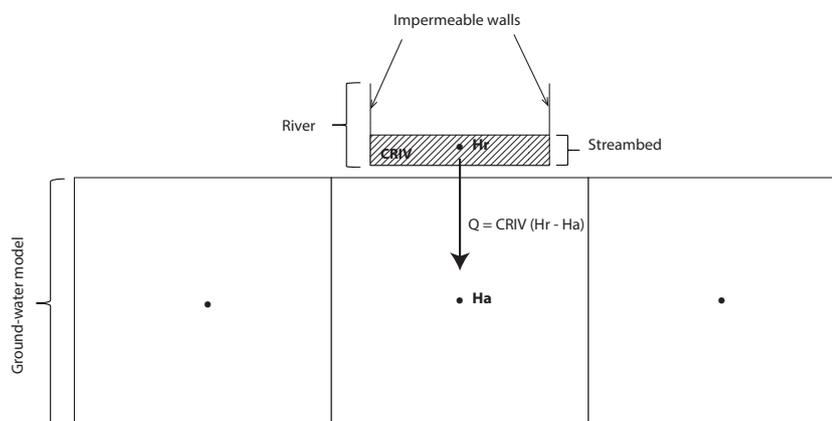
La condition de type Dirichlet, ou charge imposée est intégrée au modèle en fixant une valeur de charge à la cellule/élément le long de la limite, en l'occurrence les cellules/éléments traversés par le cours d'eau. Cette approche fonctionne en assurant la continuité du champ de pression et des flux à l'interface nappe-rivière. De fait, la charge imposée ne varie pas en fonction des conditions hydrogéologiques simulées. Cette approche nécessite un maillage fin, avec des mailles dont les dimensions (largeur et profondeur) sont au maximum égales à celles du cours d'eau. Le maillage doit obligatoirement être 3D, l'hypothèse de Dupuit-Forchheimer (horizontalité des flux) n'étant pas valide à proximité d'un cours d'eau, un maillage 2D serait considérer le cours d'eau comme étant totalement pénétrant sur l'épaisseur de l'aquifère modélisé.

Ce type de condition limite est le plus souvent utilisé dans l'étude des flux hyporhéiques à l'échelle locale (Boano et al., 2011; Cardenas, 2009; Cardenas and Wilson, 2007a; Tonina and Buffington, 2007), ou alors lors du couplage de modèle de surface aux modèles souterrains à plus grande échelle (Discacciati et al., 2002; Furman, 2008; Sulis et al., 2010). Les modèles de surface et souterrains sont soit : i) entièrement couplés, en imposant la continuité du niveau d'eau et des flux à l'interface nappe-rivière (Peyrard et al., 2008), ii) semi couplés, où les équations sont résolues séparément puis couplées soit de manière séquentielle, soit avec un cycle itératif (voir Sulis et al. (2010)), iii) découplés où les sorties du modèle de surface sont utilisées comme forçage du modèle souterrain (Cardenas, 2009; Cardenas and Wilson, 2007a). Plus récemment des modèles entièrement couplés ont vu le jour où un système matriciel couple les équations de surface avec les équations souterraines qui sont résolues simultanément. Cette méthode semble être la méthode numérique la plus stable de couplage des modèles de surface et souterrains (Peyrard et al., 2008).

De manière générale l'utilisation d'une limite de Dirichlet reste marginale, en dehors de l'étude des échanges hyporhéiques.

### 2.5.2 Condition de type Cauchy

Avec une condition de type Cauchy, le cours d'eau est hydrauliquement connecté à la cellule/élément mais n'occupe pas physiquement d'espace au sein du maillage (Figure 2.6). Le flux échangé à l'interface nappe-rivière est alors calculé par le produit d'un coefficient de conductance ( $CRIV$ ) par la différence de charge entre la rivière et la cellule où la condition de Cauchy est appliquée.



**Figure 2.6** : Représentation conceptuelle en coupe d'une rivière dans un modèle à conductance

Le volume nappe-rivière échangé est exprimé ainsi :

$$Q_s = CRIV \times (H_s - H_c) \quad (2.2)$$

Où  $Q_s$  [ $L^3T^{-1}$ ] est le débit de la rivière à l'aquifère,  $H_s$  [L] est le niveau d'eau en rivière,  $H_c$  [L] est la charge hydraulique au centre de la cellule où la condition de Cauchy est appliquée,  $CRIV$  [ $L^2T^{-1}$ ] est le terme conductance (coefficient rivière).

Lorsque Prickett and Lonquist (1971) introduisent le concept de conductance pour représenter les interactions nappe-rivière dans les modèles hydrogéologiques, ils suggèrent un modèle conceptuel simplifié où les pertes ou les gains d'une rivière sont gouvernés par la perméabilité des dépôts du lit de la rivière (Figure 2.6). La difficulté principale de cette approche réside dans l'estimation de la conductance qui va contrôler les échanges entre la nappe et la rivière. Plusieurs méthodes, plus ou moins complexes permettent d'avoir une approximation de la conductance (Flipo et al., 2014; McDonald and Harbaugh, 1988; Mehl and Hill, 2010; Morel-Seytoux, 2009; Morel-Seytoux et al., 2014; Rushton, 2007).

$CRIV$  est habituellement contraint par calibration (Doppler et al., 2007; Pryet et al., 2015b). Cependant, le caractère souvent "mal-posé" (*ill-posed*) des modèles hydrogéologiques (forte corrélation entre paramètres, équi-finalité) peut entraîner une mauvaise estimation des paramètres par calibration (Carrera et al., 2005; Zhou et al., 2014). Les méthodes de régularisation, comme par exemple la spécification d'une valeur préférée des paramètres (régularisation de Tikhonov) peuvent permettre de pallier en partie à ce problème (Doherty, 2015; Doherty and Skahill, 2006) d'où la nécessité de renseigner une valeur initiale et de régularisation

de *CRIV* cohérente. La difficulté avec *CRIV* c'est qu'il "contient" plusieurs phénomènes physiques et qu'il ne peut pas être mesuré sur le terrain. La section suivante propose alors une méthode pour calculer une valeur initiale et de régularisation de *CRIV* à partir de paramètres physiques mesurables sur le terrain ou en laboratoire. Cette section est présentée sous forme d'un article publié dans la revue *Groundwater*.



## Chapitre 3

# Estimating River Conductance from Prior Information to Improve Surface-Subsurface Model Calibration

# Estimating River Conductance from Prior Information to Improve Surface-Subsurface Model Calibration

by Yann Cousquer<sup>1,2</sup>, Alexandre Pryet<sup>1</sup>, Nicolas Flipo<sup>3</sup>, Célestine Delbart<sup>1,2,4</sup>,  
Alain Dupuy<sup>1</sup>

*Accepted for publication in Groundwater*

---

## Abstract

Most groundwater models simulate stream-aquifer interactions with a head - dependent flux boundary condition based on a river conductance (*CRIV*). *CRIV* is usually calibrated with other parameters by history matching. However, the inverse problem of groundwater models is often ill-posed and individual model parameters are likely to be poorly constrained. Ill-posedness can be addressed by Tikhonov regularization with prior knowledge on parameter values. The difficulty with a lumped parameter like *CRIV*, which cannot be measured in the field, is to find suitable initial and regularization values. Several formulations have been proposed for the estimation of *CRIV* from physical parameters. However, these methods are either too simple to provide a reliable estimate of *CRIV*, or too complex to be easily implemented by groundwater modelers. This paper addresses the issue with a flexible and operational tool based on a 2D numerical model in a local vertical cross-section, where the river conductance is computed from selected geometric and hydrodynamic parameters. Contrary to other approaches, the grid size of the regional model and the anisotropy of the aquifer hydraulic conductivity are also taken into account. A global sensitivity analysis indicates the strong sensitivity of *CRIV* to these parameters. This enhancement for the prior estimation of *CRIV* is a step forward for the calibration and uncertainty analysis of surface-subsurface models. It is especially useful for modeling objectives that require *CRIV* to be well known such as conjunctive surface water – groundwater use.

---

<sup>1</sup> EA 4592 Georessources & Environment, Bordeaux INP and Univ. Bordeaux Montaigne, EN-SEGID, 1 allée F. Daguin, 33607 Pessac cedex, France

<sup>2</sup> Le LyRE, SUEZ Environnement, Domaine du Haut-Carré 43, rue Pierre Noailles, 33400 Talence, France

<sup>3</sup> Geosciences Department, MINES ParisTech, PSL Research University, 35 rue Saint-Honoré, 77305 Fontainebleau, France

<sup>4</sup> Université François Rabelais de Tours, EA 6293 GéHCO, Parc de Grandmont, 37200 Tours, France

### 3.1 Introduction

Numerical models are increasingly used to explore stream-aquifer interactions in a scope of water resources protection and management (Fleckenstein et al., 2010; Flipo et al., 2014; Kalbus et al., 2006). Due to the continuity between these two entities, the development or the contamination of one is likely to affect the other (Sophocleous, 2002). In such contexts, stream-aquifer flow needs to be carefully quantified.

In groundwater models, stream-aquifer flow can be considered with three kinds of boundary conditions : prescribed head (Dirichlet-type), head-dependent flux (Cauchy-type) and specified flux (Neumann-type). The last kind of boundary condition is rarely used to simulate streams. When a prescribed head is employed, the hydraulic head in the stream is imposed at the aquifer cells crossed by the stream. This kind of boundary condition is most often limited to the study of hyporheic flow at the local scale (Boano et al., 2011; Cardenas, 2009; Cardenas and Wilson, 2007b; Tonina and Buffington, 2007; Zlotnik et al., 2015) or in the case of coupled surface - subsurface models (Discacciati et al., 2002; Furman, 2008; Sulis et al., 2010). However, the use of prescribed head boundary conditions for simulating streams is rare at the regional scale (Peyrard et al., 2008).

Stream to aquifer flow is usually parameterized with a river conductance ( $CRIV$ ) using a head-dependent flux (Cauchy-type) boundary condition (Ebel et al., 2009; Flipo et al., 2014; Furman, 2008; Goderniaux et al., 2009) such as implemented in the MODFLOW river package (Furman, 2008; McDonald and Harbaugh, 1988). The stream-aquifer exchange flow is calculated as the product of  $CRIV$  by the head difference between the stream and the cell where the Cauchy-type boundary condition is applied :

$$Q_s = CRIV \times (H_s - H_c) \quad (3.1)$$

where  $Q_s$  [ $L^3 T^{-1}$ ] is the stream-aquifer flow,  $H_s$  [L] is the stream water level,  $H_c$  [L] is the hydraulic head at the center of the cell where the Cauchy-type boundary condition is applied.  $CRIV$  accounts for numerous processes and properties; it is a lumped parameter that cannot be measured on the field (Ebel et al., 2009; McDonald and Harbaugh, 1988; Rushton, 2007). As a consequence, the value of  $CRIV$  is commonly calibrated by history matching together with the other unknown hydraulic parameters (Engeler et al., 2011; Pryet et al., 2015b). Surface-subsurface models are affected by the quasi-systematic ill-posed nature of hydrogeological inverse problems, which is now widely known (Carrera et al., 2005; Zhou et al., 2014). Ill-posedness may lead to non-uniqueness, non-existence and non-steadiness of the inverse model solution (Zhou et al., 2014). An infinite number of parameter sets can equally well calibrate the model. In order to deal with the issue, several options have been proposed. Among them, Tikhonov regularization with prior information about model parameters has proven its efficiency (Hunt et al., 2007; Tikhonov, 1963). Calibration with Tikhonov regularization considers soft knowledge on model parameters in the calibration, so as obtain a well-posed problem (Aster et al., 2005; Doherty and Skahill, 2006). In

order to perform a calibration with Tikhonov regularization, there is a need for soft knowledge about model parameters. In general, soft knowledge comes from field measurements, literature or expert knowledge. For example, aquifer hydrodynamic properties, such as transmissivity and porosity, can be characterized from aquifer and permeability tests in the field or at the laboratory. However, as  $CRIV$  is a lumped parameter that encompasses many processes controlling stream-aquifer flow, it is challenging to estimate suitable initial and regularization values.

When Prickett and Lonquist (1971) introduced the concept of river conductance, they considered a simplified conceptual model where stream-aquifer flow is controlled by the thickness and vertical hydraulic conductivity of streambed deposits. This widely used approach is described in the MODFLOW river package (McDonald and Harbaugh, 1988) and reads as follows :

$$CRIV = \frac{Kr \times L \times W}{M} \quad (3.2)$$

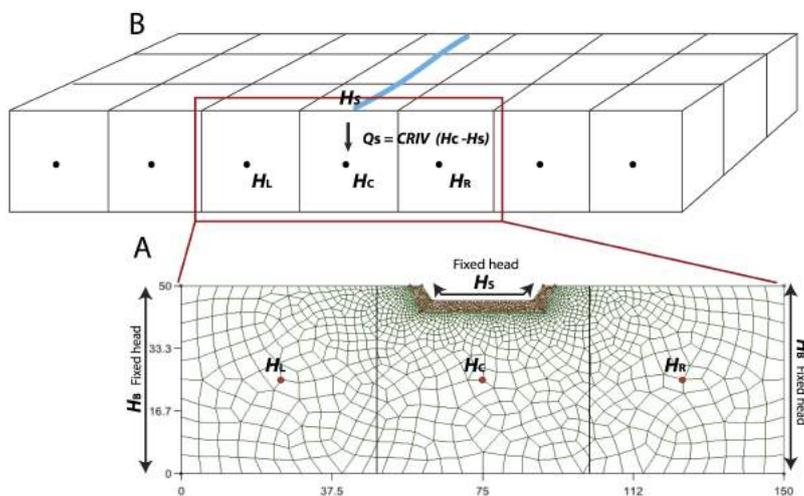
where  $W$  [L] is the stream width,  $L$  [L] is the length of the river reach within the grid cell,  $M$  [L] is the streambed thickness and  $Kr$  [L T<sup>-1</sup>] is the hydraulic conductivity of the streambed. More parameterized methods have since been implemented in MODFLOW, as SFR1 and SFR2 ((Niswonger and Prudic, 2005; Prudic et al., 2004). These methods extend the original expression (McDonald and Harbaugh, 1988), so as to include additional parameters such as the hydraulic gradient along the stream, and complex river cross-sections.

These formulations based on the Prickett and Lonquist (1971) model and used in the MODFLOW family of codes assume that all head losses occur in the streambed. Aquifer hydrodynamic properties and grid size are not taken into account. In fact, the value of  $CRIV$  depends on numerous additional parameters such as aquifer hydraulic conductivity and should also account for the effect of additional head losses due to converging / diverging flow that cannot be considered in a 2D horizontal model (Morel-Seytoux, 2009; Rushton, 2007). Moreover, the value of  $CRIV$  has been recently shown to differ by as much as 122% depending on the resolution of the model grid (Mehl and Hill, 2010).

Several alternatives for the estimation of the  $CRIV$  have been proposed, either based on analytical or numerical methods (Anderson, 2003a,b, 2005; Mehl and Hill, 2010; Morel-Seytoux, 2009; Morel-Seytoux et al., 2014; Rushton, 2007).

In line with Anderson (2003a), Morel-Seytoux (2009) proposes a formulation which takes into consideration flow convergence / divergence at the vicinity of the stream with the complex potential theory. This method is extended to more complex partially penetrating stream geometries in Morel-Seytoux et al. (2014). However, the presence of streambed deposits and the dependence of  $CRIV$  on grid size are not taken into account. Although its importance has been highlighted by Nield et al. (1994), the the anisotropy of aquifer hydraulic conductivity is not considered.

As an alternative, Rushton (2007) proposes to estimate  $CRIV$  with a 2D vertical numerical model. The 2D fine-grid model represents one single cell of the

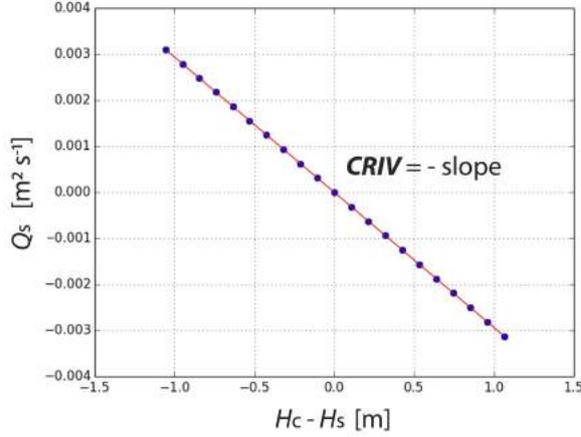


**Figure 3.1** : The local 2D vertical finite element model transverse to the river (forefront, A) is used for the estimation of the  $CRIV$  controlling the Cauchy boundary condition in the regional 2D horizontal finite difference model (background, B)

regional model centered over the stream. The river conductance is then inferred from the regression between stream-aquifer flow, on one hand, and the head difference between the aquifer cell and the stream on the other. This work points out the predominant influence of aquifer horizontal hydraulic conductivity compared to vertical streambed hydraulic conductivity for certain configurations. Rushton (2007) explains that for a relatively thin streambed (0.2 m) with a hydraulic conductivity of  $0.05 \text{ m d}^{-1}$ , less than a third of head losses occur in the streambed, the rest is due to convergent / divergent fluxes in the aquifer at the stream vicinity. However, this method does not account for anisotropy and grid size. This work first details an extension of the numerical approach developed by Rushton (2007) for the estimation of  $CRIV$ . Numerous parameters often neglected so far are considered. The use of the method is illustrated with a synthetic application, where the value of  $CRIV$  is estimated and provided with a confidence interval. A parametric study is then conducted to describe the respective effects and sensitivities of  $CRIV$  to controlling parameters. The advantages and limitations of the methodology are then discussed.

## 3.2 The Approach

The approach proposed in this work consists in computing the  $CRIV$  used in a 2D horizontal large-scale finite difference model from a 2D vertical local scale model transverse to the stream (Figure 3.1).



**Figure 3.2 :** The value of  $CRIV$  can be inferred by linear regression of stream aquifer flow per unit river length,  $Q_s$  [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ] against the difference in hydraulic head between the aquifer cell ( $H_c$ ) and the stream ( $H_s$ ).  $Q_s$  is an output of the vertical model. The effect of grid size is taken into account through  $H_c$ , computed with Eq. 3.4.2

Although a longitudinal component may sometimes be observed (Woessner, 2000), aquifer flow is assumed to be strictly perpendicular to the stream. In addition, boundary conditions are imposed so that the stream and the aquifer remain hydraulically connected. Transient flow and disconnection are beyond the scope of this study, more information on the subject can be found in Brunner et al. (2009, 2011); Rivière et al. (2014). The vertical model is run several times, with the same geometry using different head differences between the stream and the aquifer. After these executions of the vertical model,  $CRIV$  is obtained by linear regression between the stream-aquifer flow and the head difference between the stream and the aquifer cell where the Cauchy boundary condition is applied (Figure 3.2).

### 3.2.1 The 2D Vertical Fine-Grid Model

The 2D vertical local scale cross-section model covers the extent of three cells of the horizontal model in a direction transverse to the stream (Figure 3.1). A fixed head boundary condition,  $H_S$ , is imposed to the nodes located at the stream-aquifer boundary. The presented method considers symmetric head conditions. A fixed head,  $H_B$ , is applied at both sides of the model lateral boundaries (Figure 3.1).

Other boundaries of the local model are impermeable. The flow equation is solved with the variable saturation, finite element code SUTRA (Voss, 1984). This mo-

del was chosen because it can simulate an unconfined aquifer in a vertical plan. Furthermore, it is compatible with unstructured grids, which provide flexible refinement possibilities and a good representation of stream bottom geometry. The model grid is composed of quadrilateral elements generated with Gmsh depending on selected model geometry (Geuzaine and Remacle, 2009).

### 3.2.2 Vertical Model Extent and Horizontal Grid Size Cell

In this study, we consider that  $CRIV$  accounts for all head losses due to converging / diverging flows in the vicinity of the stream. As a consequence, the grid cell of the horizontal model where a Cauchy-type boundary condition is applied should be large enough to include all the converging / diverging flows associated with the stream. For these reasons, the distance away from the stream where groundwater flow is horizontal,  $X_{far}$ , must be estimated. In other words,  $X_{far}$  corresponds to the distance from the stream where the Dupuit-Forchheimer approximation is valid. A "characteristic leakage length"  $\lambda$  [L] can be used to approximate  $X_{far}$ , as 95% of converging / diverging flows are included in  $3\lambda$  from surface water shore (Haitjema, 2006; Haitjema et al., 2001; Hunt et al., 2003). Here,  $X_{far}$  can be easily inferred from the vertical model in the configuration where  $X_{far}$  is the largest, i.e. with the maximum head gradient between the stream and the aquifer. We will assume that  $X_{far}$  is reached when the ratio between the vertical and the horizontal components of groundwater flow is less than 5%. Assuming the stream to be located at the center of the cell in the horizontal model where a Cauchy-type boundary condition is applied, this cell should be at least as large as  $2 X_{far}$ . The computation of  $X_{far}$  is a preliminary step to the calculation of  $CRIV$ , as it constrains the grid resolution of river cells in the large-scale horizontal model.

### 3.2.3 The Determination of the River Conductance

Stream - aquifer flow is computed with the vertical model for a set of values of head - gradient between the stream and the aquifer. To this effect, different values of  $H_B$  are imposed at the lateral boundaries of the local model while the stream level,  $H_S$ , remains fixed (Figure 3.1). Interactions between the different parts of the model are managed with a Python script : (1) the user defines the input variables listed in (Table 3.1), consisting of hydrodynamic properties and geometric settings (Figure 3.3); (2) Gmsh software is run to build the grid with the user defined geometry ; (3) SUTRA input files are generated from grid coordinates and hydrodynamic parameters (Table 3.1); (4) the following steps (4.a) and (4.b) are repeated for different values of stream-aquifer head difference : (a) SUTRA is run (b) SUTRA output files are post-processed so as to extract stream-aquifer flow ; eventually, (5) the unit length river conductance coefficient ( $CRIV_u$ ) is inferred by linear regression between the computed stream-aquifer flow and the head difference between the stream and the aquifer ( $H_C - H_S$ ) (Figure 3.2). Given the linearity between the stream-aquifer flow and the head difference between the stream and the connected aquifer (Figure 3.2), the linear regression of step (5)

Parameters	Value	Unit	GSA range
Aquifer thickness ( $ct$ )	30	[m]	-
Horizontal model cell width ( $cw$ )	100	[m]	[15, 200]
River width ( $w$ )	10	[m]	[5, 10]
River depth ( $d$ )	1	[m]	[1, 5]
Bank angle ( $a$ )	90	[-]	[90, 100]
Riverbed thickness ( $m$ )	0	[m]	[1, 10]
Aquifer horizontal hydraulic conductivity ( $K_h$ )	10-3	[m s <sup>-1</sup> ]	[1e-5, 1e-1]
Riverbed vertical hydraulic conductivity ( $K_{vb}$ )	-	[m s <sup>-1</sup> ]	[1e-5, 1e-1]
Anisotropy ( $anis$ )	0.1	[-]	[1e-3, 1]

**Tableau 3.1 :** Geometric and hydrodynamics parameters used in the illustrative case. The second column provides the most probable value for each parameter ; the fourth is the chosen range to perform the probabilistic sampling for the Global Sensitivity Analysis.

may be reduced to a simple ratio considering only two distinct head differences. However considering multiple head differences (approximately 10) is a quality check, which makes the method more robust to potential model failures.

The obtained  $CRIV_u$  [L T<sup>-1</sup>] accounts for stream-aquifer flow per unit river length.  $CRIV_u$  should therefore be multiplied by the length of the stream reach within the grid cell ( $L$ ) to obtain  $CRIV$  [L<sup>2</sup> T<sup>-1</sup>] as used in MODFLOW.

### 3.2.4 Grid-Size Dependence of Cauchy Boundary Conditions

One of the difficulties of this approach is to obtain the value of  $H_c$  in the vertical model, which corresponds to the head at the center of the middle cell in the horizontal model (Figure 3.4).

Because of divergent / convergent fluxes,  $H_c$  cannot be obtained from the vertical model at its corresponding location. In contrast, finite-element mesh nodes at the centers of adjacent cells ( $L$  and  $R$ , Figure 3.4) are located far enough from the stream for vertical flow to be negligible so that  $HL$  and  $HR$  can be directly inferred from the vertical model. To address the issue, a relation between  $HL$ ,  $HR$  and  $HC$  can be established from the diffusivity equation in finite difference expressed in steady conditions for the central cell of the horizontal model (Figure 3.4). The flow from the left and right cells to the middle cell is deduced from Darcy's law :

$$Q_L = T_{L-C} \times (H_L - H_C) \times \frac{1}{cw} \times L \quad (3.3)$$



$$Q_R = T_{R-C} \times (H_R - H_C) \times \frac{1}{cw} \times L \quad (3.4)$$

where  $Q_{L/R}$  [ $L^2 T^{-1}$ ] is the flow between right / left cells and center cell,  $H_{L/R}$  [L] is the hydraulic head at the centroid of the right / left cell,  $H_C$  [L] is the hydraulic head at the centroid of center cell;  $cw$  [L] is the width of the cells.  $T_{(L/R)-C}$  [ $L^2 T^{-1}$ ] is the equivalent transmissivity between the right / left cell and the middle cell.

Assuming that the component of groundwater flow longitudinal to the stream is negligible, the equation of mass conservation in steady state expressed for the middle cell reads as follows :

$$Q_L + Q_R + Q_S = 0 \quad (3.5)$$

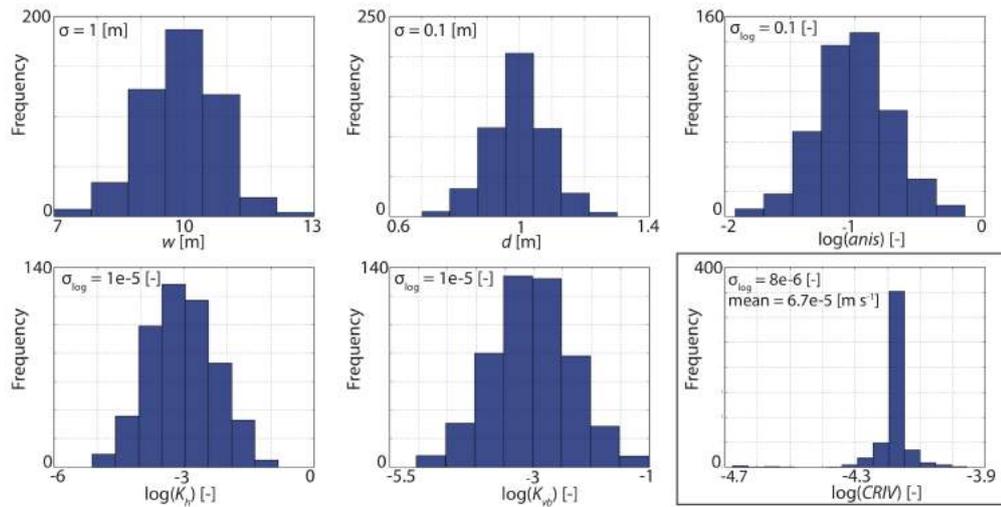
where  $Q_S$  is the flow from the stream to the middle cell. Combining Eqn. 3.2.4, 3.2.4 and 3.2.4 we obtain :

$$H_c = \frac{1}{2} \left( \frac{Q_S \times cw}{T \times L} + H_L - H_R \right) \quad (3.6)$$

where the values of  $Q_S$ ,  $H_L$  and  $H_R$  are provided by the vertical model, and  $T$  is the aquifer transmissivity, assumed to be homogeneous and independent of hydraulic head over the three cells of interest ( $T_{L-C} = T_{R-C}$ ).  $H_L$  and  $H_R$  are taken at a single node in the centroid of  $L$  and  $R$  cells of the vertical model. Using this latter expression of  $H_C$  for the regression of  $Q_S$  against  $(H_C - H_S)$ , we consider the dependence of the horizontal grid-size,  $cw$ , for the calculation of the river conductance.

### 3.3 Applications of the Methodology

So as to illustrate the interest of the approach, we consider a 2D horizontal large-scale groundwater model where the simulated aquifer interacts with a stream. The characteristics of the aquifer and the stream are chosen to correspond to a classical context (Table 3.1). The value of  $CRIV$  used in the large-scale horizontal model will be eventually adjusted by calibration together with other model parameters, but this is out of the scope of this study. However, when the accurate quantification of stream-aquifer flow is essential, initial and regularization values should be carefully chosen for the calibration of  $CRIV$ . In addition, the probabilistic distribution of  $CRIV$  prior to calibration is also useful for post-calibration uncertainty analysis.



**Figure 3.5** : The probabilistic distribution of  $CRIV$  (bottom right) is obtained with the presented tool from the distributions of input parameters.

### 3.3.1 Estimation of the River Conductance From Expected Parameter Values

The most probable parameter values for this synthetic case (Table 3.1) are set in the Python script, which generates the finite-element grid and runs the model for various head differences between the stream and the aquifer.  $X_{far}$  is first calculated with the tool so as to take into account the grid size. With an  $X_{far}$  of about 50 m, the river cell size in the horizontal model should be set to 100 m. With these parameter values for this synthetic case,  $CRIV_u$  is estimated at  $6.6910^{-5} \text{L T}^{-1}$  with a computation time shorter than a minute. Multiplied by the length of the reach within the grid cell of the model (100 m), the value of  $CRIV$  is  $6.6910^{-3} \text{L}^2 \text{T}^{-1}$ . This value can be used as initial and regularization values for the calibration of the horizontal model (Hunt et al., 2007).

### 3.3.2 Prior Probabilistic Distribution of the River Conductance

The probabilistic  $CRIV$  distribution can also be obtained with the presented tool by random sampling from the prior statistical distributions of input parameters. We assumed a normal distribution for geometric parameters and log-normal distribution for hydrodynamic parameters (Table 3.1, Figure 3.5).  $CRIV$  is then computed for each of the parameter sets. The resulting  $CRIV$  distribution (Figure 3.5) is an essential element to perform parameter and predictive uncertainty analysis (Gallagher and Doherty, 2007).

## 3.4 Sensitivity of the River Conductance to Hydrodynamic and Geometric Parameters

The effect of the parameters considered in this study over  $CRIV$  is first illustrated with parameter variations, taken one by one, from the reference configuration of the stream described in (Table 3.1). This parametric analysis is useful to describe how each parameter may impact  $CRIV$  in a regular stream-aquifer configuration. A global sensitivity analysis is thereafter performed to rank the sensitivities of  $CRIV$  to its parameters over a wide range of realistic parameter values.

### 3.4.1 Parametric analysis

$CRIV$  values have been calculated for a range of likely values of aquifer hydraulic conductivity ( $K_h$ ) and anisotropy ( $anis$ ), horizontal grid size ( $cw$ ), and streambed vertical hydraulic conductivity ( $K_{vb}$ ) (Figure 3.6). When they are fixed, parameters are kept to the reference values from the synthetic case study (Table 3.1).

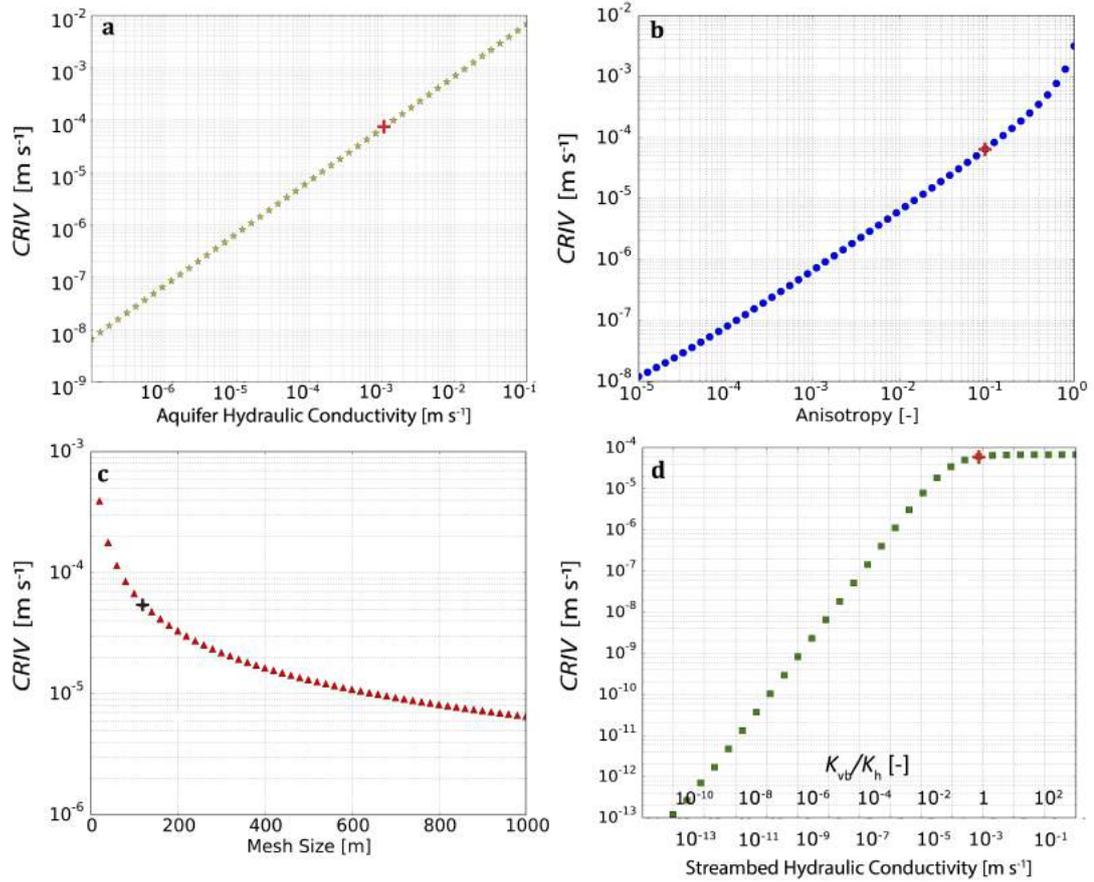
Several studies solely base the estimation of  $CRIV$  on  $K_h$  (Pryet et al., 2015b; Rushton, 2007). This approach is validated here, since  $K_h$  is one of the most important controlling factors of the stream aquifer exchanges for this case (Figure 3.6 a). A modification by one order of magnitude of  $K_h$  produces a modification by one order of magnitude of  $CRIV$ .

The influence of  $anis$  (Figure 3.6 b) (which stands for  $K_v/K_h$  where  $K_v$  is the vertical hydraulic conductivity of the aquifer [ L T<sup>-1</sup>]) is explained by the occurrence of vertical flow in the vicinity of the stream. A high value of anisotropy impedes the occurrence of converging / diverging flow and reduces stream-aquifer flow. An increase by one order of magnitude of  $anis$  (from 1 and 0.1) leads to an increase of  $CRIV$  by a factor approaching 30. Modelers often choose a rather arbitrary value of 0.1 for  $anis$  (Derx et al., 2010; Doppler et al., 2007; Engeler et al., 2011) following Chen (2000). Our results highlight that an inappropriate value of anisotropy may imply a large error on stream-aquifer flow estimates.

The influence of the grid size of the horizontal model,  $cw$ , is also important (Figure 3.6 c).  $CRIV$  decreases by a factor of 25 when the grids cell size increases from 10 to 110 m. The influence of  $K_{vb}$  is highly non-linear (Figure 3.6 d). As long as  $K_{vb}$  is greater than  $K_h$ ,  $K_{vb}$  has no influence on  $CRIV$ . In contrast, when  $K_{vb}$  is lower than  $K_h$ ,  $CRIV$  decreases with  $K_{vb}$ . We recall that in this study,  $CRIV$  is calculated for values of the  $K_{vb}/K_h$  ratio that remain characteristic of a connection between the stream and the aquifer (Brunner et al., 2009).

In the range of likely values for hydrogeological model parameters, the most important controlling factors of  $CRIV$ , in this case, are, in decreasing order of importance (Figure 3.5) :  $K_h$ , which can change  $CRIV$  by six orders of magnitude ii)  $K_{vb}$  by four orders of magnitude iii)  $cw$  by three orders of magnitude iv)  $anis$  by two orders of magnitude. However a variation by one order of magnitude in  $anis$  or  $cw$  has more impact on  $CRIV$  than  $K_h$  and  $K_{vb}$ .

This parametric analysis is relevant to graphically illustrate how each parameter affects  $CRIV$ . However, this method is very dependent on the choice of reference



**Figure 3.6 :** Dependence of  $CRIV_u$  per unit river length to model parameters values : a) streambed hydraulic conductivity ( $K_{vb}$ ) b) aquifer anisotropy ( $anis$ ) c) horizontal grid size ( $cu$ ) d) Aquifer hydraulic conductivity ( $K_h$ ). Cross marks indicate reference parameter values (Table 3.1)

parameter values and does not quantify the effect of joint parameter variations. Those issues can be addressed with a global sensitivity analysis.

### 3.4.2 Global Sensitivity Analysis of CRIV

The importance of the parameters used to compute *CRIV* is discussed here through a global sensitivity analysis (GSA). Compared to the sensitivity analysis based on the local derivative (Hill and Tiedeman, 2006), the GSA can be applied to non-linear models, and provides more robust information on the effect of respective parameters to a model output, here *CRIV*. Over the large variety of GSA methods, the variance-based sensitivity indicator (Sobol) is largely used (Saltelli et al., 2004; Sobol, 2001; Welter et al., 2015). Sobol method is based on the analysis of model output values obtained from a large range of parameters sets sampled from probabilistic distributions (Saltelli et al., 2004). This is applicable to non-linear models. The sensitivity of each parameter is described by the first order sensitivity index, which is the contribution of a single model parameter to the model output variance (Sobol, 2001) :

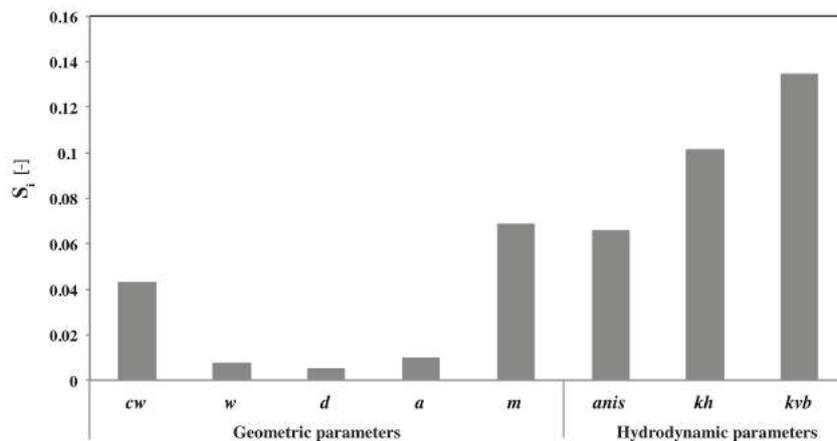
$$S_i = \frac{V_i}{V_{tot}} \quad (3.7)$$

Where  $V_i$  is the variance of *CRIV* attributed to the  $i$ -th parameter and  $V_{tot}$  is the variance of model output *CRIV*.

Parameter lower and upper bounds are provided in Table 3.1. About 15,000 *CRIV* values have been computed with a uniform distribution of parameter sets obtained with the Saltelli sampler (Saltelli et al., 2004) from Jon and Usher (2015) Python script.

The influence of hydrodynamic parameters prevails over geometric parameters (Figure 3.7). Results highlight the strong influence of hydrodynamics parameters  $k_{vb}$ ,  $k_h$  and *anis*. Taken together they account for 30% of the total *CRIV* variance, as they respectively explain 14%, 10% and 6% of the *CRIV* variance. Geometric parameters such as stream depth and bank angle have a small effect. Taken together, they account for ca. 2% of the *CRIV* variance. However the grid cell size (*cw*) has more influence on *CRIV* with 4.5% of the *CRIV* variance as well as the riverbed thickness (*m*) with 7% of the *CRIV* variance. In total, 43.5% of the total *CRIV* variance is explained by parameters taken alone, the remaining 56.5% is explain by the interactions between parameters.

Results of the GSA confirm the observations made with the parametric analysis.  $K_h$ ,  $K_{vb}$  and *anis* are the major controlling factors; *cw* and *m* are strong controlling factors. While  $K_h$  and  $K_{vb}$  are generally taken into account for the estimation of *CRIV*, the importance of *anis* and *cw* is often disregarded. Our results highlight that neglecting the importance of these parameters may induce an error by multiple orders of magnitude on the value of *CRIV*.



**Figure 3.7 :** Global sensitivity analysis (GSA) of the  $CRIV$  coefficient to model parameters where  $S_i$  is the first order sensitivity index. The main controlling factors of  $CRIV$  are  $K_{vb}$ ,  $K_h$ ,  $anis$  and  $m$  and in a lesser extent  $cw$ . The Parameter ranges are presented Table 3.1

### 3.5 Discussion

The proposed method aims at constraining the value of  $CRIV$  from a local vertical model given hydrodynamic and geometric parameters. These parameters correspond to physical properties potentially measurable in the field or at the laboratory. Geometric parameters such as stream width, depth and bank angle, aquifer and streambed thicknesses can be easily obtained from direct measurements, geological logs or geophysical methods (Cardenas and Markowski, 2010b). The spatial variability of these parameters can also be investigated based on local hydrogeophysical measurements (Mouhri et al., 2013). Hydrodynamic properties of the aquifer and the streambed can be characterized from pumping and permeability tests in the field or at the laboratory (Chen, 2000). The measurement of hydraulic heads at different depths near a stream can provide estimates of the anisotropy of hydraulic conductivity (Kalbus et al., 2006). However, it should be acknowledged that obtaining reliable and representative estimates for each of the hydrodynamics parameters is challenging.

As demonstrated by numerous authors Gaffield et al. (1998); Gianni et al. (2016); Levy et al. (2011), the use of a temporally and spatially constant value for  $CRIV$  is questionable and can be affected by biological clogging in the riverbed (Newcomer et al., 2016). However it is so far considered as constant in regional models. For the spatial aspect, the user can split the stream network in interaction with the simulated aquifer into a limited number of reaches sharing common features (aquifer properties, stream geometry, ...) and estimate a value of  $CRIV$  for each of the respective reaches.

The accuracy of  $CRIV$  estimates obtained with the proposed method depends on the uncertainty of the parameters of the local scale vertical model, as shown

by the probabilistic *CRIV* distribution (Figure 3.5). A calibration step is generally needed where the value of *CRIV* estimated with the presented approach is used as initial and regularization values. Calibration by history matching is usually conducted against observations of stream flow and groundwater level fluctuations (Engeler et al., 2011; Pryet et al., 2015b). However, obtaining an initial value from prior information can be critical. Pryet et al. (2015b) based their initial estimates on the relation between *CRIV* and horizontal hydraulic conductivity developed by Rushton (2007). Our method improves this approach by including in the prior estimate of *CRIV* numerous parameters often neglected. Obtaining objective initial and regularization values of *CRIV* from the approach presented in this paper is a significant improvement to the uniformed and evaluated calibration of *CRIV*. Moreover, our method takes into consideration the effect of grid-size, providing an upscaling procedure for the estimation of *CRIV* from the local scale to the watershed scale ( 10- 1000 km<sup>2</sup>) (Flipo et al., 2014; Mehl and Hill, 2010). Given these elements, the method described in this study is likely to improve simulation of stream-aquifer interactions, especially at the scale of watersheds (Flipo et al., 2012).

The method presented in this study has been developed with the assumption of symmetric settings with a straight stream located at the center of a horizontal model cell. The precision of *CRIV* estimated with this approach may therefore become questionable when the configuration of interest strongly deviates from this simplified model, such as very winding stream with important meanders within a single horizontal model cell. Such configurations may require a 3D local model for the estimate of *CRIV*. However, the gain of precision with such a more complex approach is likely to be small with respect to the irreducible uncertainty attributed to the estimates of controlling parameters, in particular aquifer and riverbed hydraulic properties. The value of *CRIV* obtained with the presented approach should be considered as a first, but objective estimate that can subsequently be adjusted by calibration.

## 3.6 The Software

So as to simplify the tedious task of considering multiple configurations, a flexible Python script has been developed and is provided as supplementary materials to this article. It can be used to estimate a value of *CRIV* from a single parameter set, or to obtain the probabilistic distribution of *CRIV* given the probabilistic distributions of input parameters. The code is available here : <https://github.com/rivtools/criv>

## 3.7 Conclusion

A method has been described to compute the value of *CRIV* with a vertical fine-grid cross-sectional model transverse to the stream. This model is applicable to a wide range of stream characteristics, aquifer properties and grid resolutions. The

value of  $CRIV$  can now be estimated from physical parameters that can be measured in the field. Parameters, neglected so far are now taken into account : i) the anisotropy of aquifer hydraulic conductivity, and ii) the size of river cells in the regional model grid. The global sensitivity analysis highlighted the importance of these parameters and justifies their consideration. The estimate of  $CRIV$  from prior information can constitute initial and regularization values for the calibration of a surface-subsurface model. This is crucial when the inverse problem is ill-posed, which is often the case. The approach also provides the probabilistic distribution of  $CRIV$  given input parameter probabilistic distributions, which is essential for post-calibration uncertainty analysis.

### 3.8 Acknowledgments

This work was conducted in the frame of the *Mhyqadeau* project supported by *Suez Environnement (LyRE)* and the French *Aquitaine* regional council. The authors are very grateful to Dr. Randal J. Hunt and two anonymous reviewers for their valuable comments for improving this manuscript. We also thank Clotilde Thompson for her help in improving English language.

### 3.9 Appendix A : Validation of the Local Numerical Model

Stream to aquifer flow obtained from the 2D cross-sectional numerical model are validated with two analytical solutions describing stream to aquifer flow with simplified geometries. Similar stream-aquifer designs have been chosen for each validation cases. Firstly an analytical formulation given by (Morel-Seytoux, 2009) from complex potential theory approach is used. In this case, the stream is represented by a point source without the effect of a streambed deposit and the stream-aquifer flow is given by :

$$Q_S = 2 \times KL \left\{ \frac{1}{\left(\frac{0.5 \times e_B}{B_{rect}}\right) + \left(\frac{B_{rect} + \Delta x}{\bar{e}}\right)} \right\} \times (H_s - H_{r/l}) \quad (3.8)$$

Where  $L$  [L] is the length of the stream reach,  $K$  [L T<sup>-1</sup>] is the aquifer hydraulic conductivity assumed to be isotropic,  $e_B$  [L] is the aquifer depth below the bottom of the reach cross-section,  $B_{rect}$  [L] is the width of the stream, and  $\bar{e}$ [L] is the average aquifer thickness.  $\Delta x$  [L] is the distance from the riverbank to the centroids of adjacent cell  $H_{r/l}$  [L].

Another approach, proposed by Herbert (1970), considers a small circular stream channel in comparison to the saturated thickness of the aquifer  $e_B$ . The flow from the aquifer to the stream is assumed to be radial. Then, adapting the Thiem equation :

Parameters	Morel-Seytoux (2009)	Herbert (1970)	Presented method
$e_B$ [m]	28	28	28
$B_{rect}$ [m]	5	-	5
$X_{far}$ [m]	95	-	-
$e$ [m]	30.5	-	30.5
$H_s - H_c$ [m]	-	0.56	0.56
$\Delta H$ [m]	5	-	-
$r_s$ [m]	-	5	-
$K$ [m s <sup>-1</sup> ]	1E-3	1E-3	1E-3
$Q$ [m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]	1.65E-03	1.71E-03	1.75E-03
Difference	6.4%	2.4%	-

**Tableau 3.2 :** Parameters of analytical solutions used for the validation of the local numerical model

$$Q_S = \pi L K \frac{H_S - H_C}{\ln\left(\frac{0.5 \times e_B}{r_s}\right)} \quad (3.9)$$

Where  $r_s$  [L] is the effective stream radius. When the stream channel has a trapezoidal cross-section, an effective stream radius must be used. For a channel width of 10 m and a water depth of 1.0 m, the effective radius of the stream is 5.0 m (Rushton, 2007).

The values of  $Q_S$  [L<sup>3</sup> T<sup>-1</sup>] obtained with these two analytical solutions are compared to the output of the local numerical model with parameters presented in (Table ??). Stream-aquifer flow obtained from the three methods is nearly identical and validates the vertical numerical model used in the present approach.

Deuxième partie  
Conceptualisation



# Chapitre 4

## Échanges nappe-rivière à l'échelle intermédiaire : le champ captant de Thil-Gamarde

### 4.1 Introduction

Ce chapitre établit les bases du cas d'étude de cette thèse, avec comme objectif la définition du modèle conceptuel de fonctionnement hydrogéologique d'un site de production d'eau à l'échelle intermédiaire : le champ captant de Thil-Gamarde à Saint Médard en Jalle (Gironde - France). Ce chapitre s'appuie sur des travaux de terrain qui ont constitué une partie importante de ce travail de thèse. L'établissement du modèle conceptuel hydrogéologique passe par l'acquisition et l'analyse de variables pertinentes, permettant d'articuler entre eux les processus importants du système étudié. Un modèle conceptuel est une simplification du problème hydrogéologique réel tenant compte des phénomènes essentiels. Il doit pouvoir être traduit mathématiquement (Haitjema, 1995). Ainsi la capacité du modèle mathématique à fournir des prédictions fiables dépend en partie de la capacité du modèle conceptuel à rendre compte de la réalité du terrain (Anderson et al., 2015). Généralement le niveau de détail du modèle conceptuel doit être le plus simple possible en incluant seulement les processus importants vis-à-vis des objectifs à atteindre, tout en conservant un niveau de complexité suffisant pour représenter pertinemment le comportement du système (principe de parcimonie, Hill and Tiedeman (2006)). Le modèle conceptuel peut ensuite éventuellement être complexifié au cours de l'étape de modélisation.

Avec pour principal objectif la caractérisation des échanges nappe-rivière à l'échelle du champ captant, l'établissement du modèle conceptuel est basé sur l'étude des informations et données déjà disponibles ainsi que sur l'acquisition de données hydrologiques, hydrogéologiques, géophysiques et hydrogéochimiques de terrain complémentaires. Ce travail servira de base à la réalisation du modèle mathématique des écoulements et du transport à l'échelle de la zone d'étude ainsi qu'à sa calibration avec l'apport de données a priori sur les paramètres physiques du système.

## 4.2 Contexte général

Le site d'étude, situé au nord-ouest de l'agglomération bordelaise (Gironde - France), est le champ captant de Thil-Gamarde (Figure 4.1). Le champ captant est situé au cœur d'un bois d'environ 250 hectares, entouré d'un dense tissu urbain. La rivière Jalle de Saint-Médard ainsi que deux affluents intermittents traversent le champ captant à proximité directe des ouvrages. Ce site joue un rôle économique important puisque la ressource en eau y est exploitée au moyen de différents ouvrages captant l'aquifère en présence et alimente environ 20% des besoins en eau domestique de l'agglomération bordelaise (Metropole, 2016).

A l'origine, une source de débordement y fut exploitée à partir de 1857, date à laquelle l'aqueduc du Taillant fut construit pour acheminer l'eau depuis la source jusqu'à la ville de Bordeaux. En 1928, la création d'une galerie drainante marqua le point de départ d'une exploitation plus intensive de la ressource. La création de puits de prélèvement dans les années 1950 ainsi que l'ajout de barbacanes le long de l'aqueduc du Taillant a permis d'utiliser le champ captant de Thil-Gamarde comme point stratégique d'approvisionnement en eau de l'agglomération bordelaise (Caballero, 2007; Safege, 2009a). A l'heure actuelle l'aqueduc du Taillant peut véhiculer jusqu'à  $44\,000\text{ m}^3\text{ j}^{-1}$  d'eau.

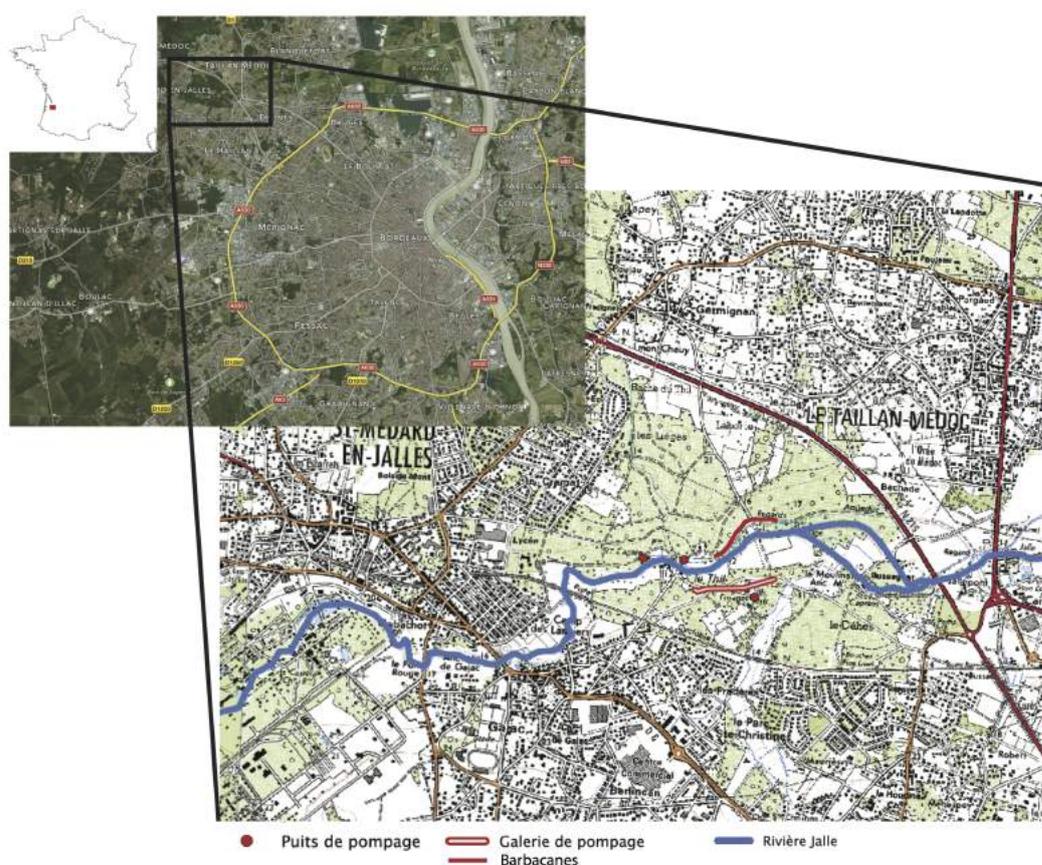
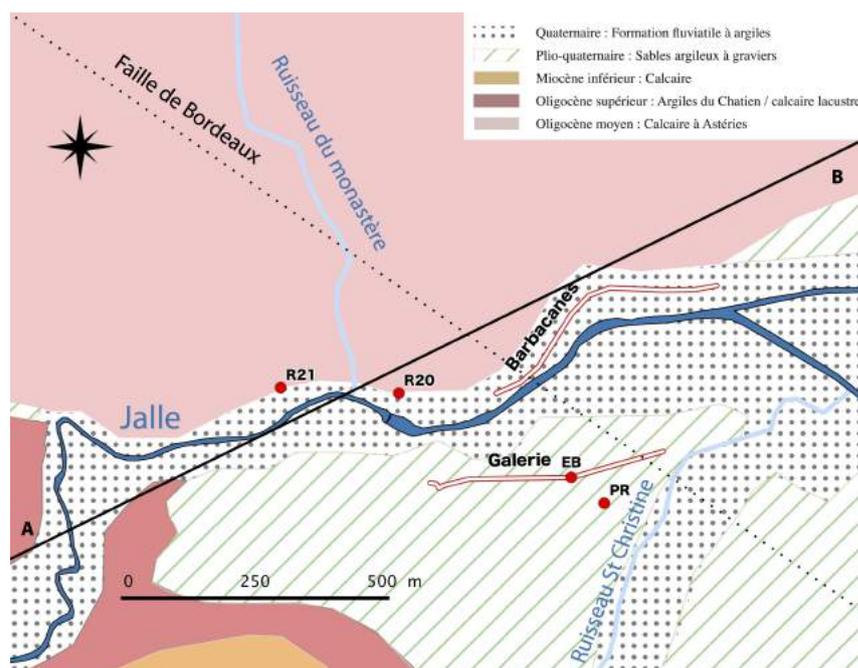


Figure 4.1 : Contexte général de la zone d'étude



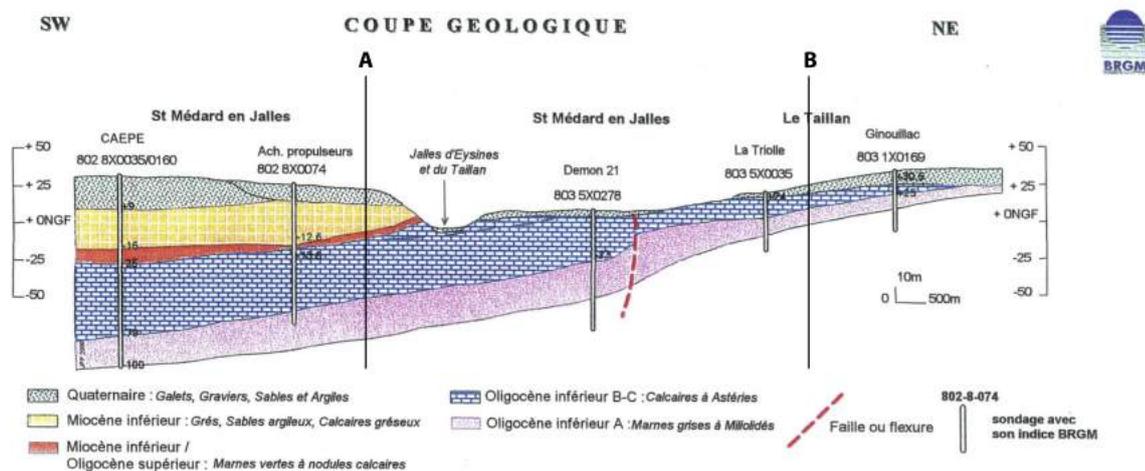
**Figure 4.2 :** Carte géologique du site modifiée d'après la carte géologique de France au 1 : 50 000 n 803 Bordeaux, BRGM 2000 avec le tracé de la coupe géologique

### 4.2.1 Géologie

La zone étudiée est située dans le Bassin Aquitain. Le champ captant de Thil-Gamarde est traversé par la faille de Bordeaux de tracé sud est – nord ouest d'âge éocène (Figure 4.2) responsable d'un décalage des terrains avec un abaissement des compartiments au Sud-Ouest. A l'affleurement, on retrouve des formations alluviales d'âge Oligocène composées de calcaires à astéries constituant l'aquifère étudié, partiellement karstifiées et des formations plio-quaternaires composées de sable des Landes et d'alluvions anciens de la Garonne. Verticalement la séquence géologique depuis le Plio-Quaternaire jusqu'à l'Oligocène inférieur est la suivante (Figure 4.3) (Canik, 1968; Larroque, 2004) :

- sables argileux et graviers du Pléistocène : formations associées au système alluvial de la Garonne ;
- sables du Burdigalien (Miocène inférieur)<sup>1</sup> ;
- calcaires gréseux à faible fraction argileuse de l'Aquitainien (Miocène inférieur)<sup>1</sup> ;
- argiles lacustres à nodules calcaires du Chattien (Oligocène supérieur) **éponte** ; Ces formations ne sont pas présentes au droit du champ captant du fait d'une discontinuité géologique, se reporter à la Figure 4.3
- calcaires à astéries du Stampien (Rupélien - Oligocène moyen / inférieur) **aquifère** ;

- marnes et calcaires lacustres type « Castillon » (Oligocène inférieur) **substratum de l'aquifère oligocène** ;
- molasses du Fronsadais (Oligocène inférieur).



copyright © BRGM 2000

**Figure 4.3** : Coupe schématique passant par la zone d'étude (BRGM), le tracé A-B de la coupe est représenté Figure 4.2. Les formations miocène et oligocènes supérieur sont en discordance sur la majorité du champ captant, ainsi les formations oligocène inférieur sont en contact direct avec les formation plio-quaternaire

La puissance des différentes formations est très hétérogène à l'échelle du champ captant, notamment pour les formations plio-quaternaires, d'épaisseur très variable à l'échelle du site (Canik, 1968), information qui est corroborée par l'étude des logs stratigraphiques des piézomètres de la zone. On distingue : un compartiment nord-est où les calcaires à astéries de l'Oligocène sont réduit (de 5 à 35 m) ; un compartiment sud-ouest où l'épaisseur est plus importante (60 à 80 m) mais recouverte par endroit par les argilles du Chattien et les formations mio-plio-quaternaires. Ce décalage s'explique par la présence de la faille de Bordeaux décalant les formations (Figure 4.3). On notera également la présence de lentilles d'argiles ou de marnes parfois présentes entre les calcaires de l'Oligocène et les formations du Plio-Quaternaire (Larroque, 2004).

#### 4.2.2 Hydrologie de surface

La zone d'étude est parcourue par un cours d'eau majeur, la Jalle de Saint-Médard, et ses ruisseaux affluents temporaires ; Sainte Christine et le Monastère (Figure 4.2). Le ruisseau Sainte Christine s'écoule la plupart de l'année mais peut s'assécher au cours de l'été alors que le ruisseau du Monastère se surimpose à une perte karstique au nord du champ captant et ne s'écoule que très rarement

lorsqu'il est en charge. La rivière Jalle d'une longueur de 32 km est un affluent de la rive gauche de la Garonne. Elle prend sa source dans la commune de Saint-Jean-d'Illac, au sud-ouest du champ captant. Alors que dans sa partie amont, la Jalle traverse des zones rurales couvertes de forêts cultivées de pins, la Jalle traverse dans sa partie aval, des zones fortement urbanisées et industrielles. Elle constitue alors l'exutoire des divers réseaux pluviaux et des stations d'épuration de ce secteur (Caballero, 2007). Après avoir traversé les zones urbanisées de la commune de Saint-Médard-en-Jalle, la Jalle traverse le champ captant de Thil-Gamarde.

## 4.3 Présentation du champ captant

### 4.3.1 Hydrogéologie et exploitation de la ressource en eau

Les aquifères exploités pour la ressource en eau font partie du continuum Oligocène - Plio-Quaternaire :

**Aquifère du Plio-Quaternaire** : aquifère libre présente sur la majorité du champ captant. Composée de sable des Landes et d'alluvions de la Garonne. Elle possède une forte hétérogénéité de conductivité hydraulique (Canik, 1968). Sa puissance varie de quelques mètres à plusieurs dizaines de mètres. Les valeurs de transmissivité sont de l'ordre de  $10^{-3} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$  dans le secteur d'étude (Caballero, 2007). Bien que cette nappe ne soit pas directement exploitée, les logs géologiques montrent qu'elle est souvent en continuité directe avec l'aquifère oligocène présentant ainsi un unique ensemble aquifère.

**Aquifère de l'Oligocène** : il se développe dans les calcaires à Astéries de l'Oligocène moyen / inférieur qui affleurent ou sub-affleurent au droit du champ captant. Ces calcaires sont partiellement karstifiés, fracturés et érodés au sommet du réservoir, les propriétés hydrodynamiques y sont hétérogènes, avec des niveaux coquilliers particulièrement productifs. L'écoulement des eaux dans l'aquifère s'effectue au travers de la porosité matricielle, de fissures et de fractures (liés au jeu de la faille de Bordeaux et potentiellement de failles transverses) avec des transmissivités variant fortement entre  $3 \times 10^{-4}$  et  $10^{-2} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$  (Caballero, 2007). Le sens d'écoulement régional s'effectue du sud-ouest vers le nord-est. De fortes variations d'épaisseur caractérisent cet aquifère. Le mur de cette nappe est constitué par les calcaires et marnes de Castillon et de molasse (observée dans la basse vallée de la Jalle). Cet aquifère est surmonté par des colluvions et d'alluvions et parfois des lentilles imperméables d'argiles ou de marnes au droit du champ captant de Thil-Gamarde, et par des formations miocènes plus à l'ouest. En fonction des secteurs la nappe oligocène est libre, semi-captive ou captive.

Le champ captant de Thil-Gamarde se décompose en deux sous-ensembles géographiques situés de part et d'autre de la rivière Jalle : Thil au nord, et Gamarde au sud. L'ensemble des ouvrages prélève de l'eau dans les calcaires à Astéries de l'Oligocène. Les ouvrages actuellement exploités sont au nombre de six, et sont décrits d'après Caballero (2007) (Figure. 4.4) :



**Domaine du Thil (rive gauche de la Jalle) :**

- Forage R21 [n°BSS : 803-5X-0279]

D'une profondeur de 6.5 m, le forage est en trou nu après -2.4 m et une cavité formée par la karstification se situe de -3.3 à -5.8 m. La transmissivité calculée suite à un essai de pompage de 24 h est estimée entre 1.2 et  $2 \times 10^{-1} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ . Actuellement, une pompe à débit asservi à une hauteur d'eau dans l'ouvrage d'environ 9 mNGF permet un débit maximum de  $230 \text{m}^3 \text{h}^{-1}$  à l'étiage et de  $500 \text{m}^3 \text{h}^{-1}$  en hautes eaux. Le fond du forage est composé d'un conglomérat d'argile et de sédiments compacts. Il n'existe aucune arrivée d'eau au fond de l'ouvrage. Des diagraphies de conductivité électrique et d'oxygène dissout réalisées pendant cette thèse ont montrées que les arrivées d'eau venaient majoritairement entre 4.7 m et le fond du forage.

- Source R21 [n°BSS : 803-5X-0280]

L'eau de cette source se déverse directement par gravité, lorsque le niveau d'eau le permet, dans un aqueduc (du "Taillan") qui achemine l'eau jusqu'à Bordeaux.

- Captage Thil R20 [n°BSS : 803-5X-0281]

D'une profondeur de 10.6 m, il est équipé d'un tubage crépiné de -1.2 m à -10.6 m. Ce captage est également équipé d'une pompe dont le débit est asservi à une hauteur d'eau dans l'ouvrage. La transmissivité calculée suite à un essai de pompage de 24 h est estimée entre 1.2 et  $2 \times 10^{-1} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$

- Barbacanes [n°BSS : 803-5X-0286]

Une quarantaine de barbacanes longues de 0.3 à 1.3 m ont été aménagées pour capter l'aquifère au niveau de l'aqueduc du Taillan, elles s'étendent sur une longueur d'environ 650 m et se déversent directement dans l'aqueduc.

**Domaine de Gamarde (rive droite de la Jalle) :**

- Galerie de Gamarde [n°BSS : 803-5X-0006]

Cet ouvrage est composé de deux galeries creusées dans le calcaire oligocène. Les arrivées d'eau se font de façon naturelle à travers le calcaire constitutif des parois. La voute de la galerie est maçonnée pour supporter les terrains sus-jacents. L'ouvrage est réalisé à environ 6 m de profondeur, ses dimensions sont de 1.75 m en hauteur et de 1.5 m en largeur avec une longueur de 500 m. Le pompage de la galerie de Gamarde s'effectue au niveau de la "bâche eau brute (EB)" à mi-longueur de la galerie. Le débit de pompage de la galerie de Gamarde se situe autour de  $270 \text{m}^3 \text{h}^{-1}$ .

- Puits rayonnant [n°BSS : 803-5X-0008]

Il s'agit d'un puits à 5 drains rayonnants autour d'un puits central de 17.3 m de profondeur cimenté au fond. Cet ouvrage est hors service à l'heure actuelle et ne fonctionne que très ponctuellement pour les besoins d'études spécifiques. La transmissivité calculée suite à un essai de pompage de 24h dans l'ensemble de l'ouvrage est estimée entre 3.5 et  $2.9 \times 10^{-1} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ .

### 4.3.2 Vulnérabilité du champ captant

De part sa localisation en périphérie de l'agglomération bordelaise et son ancrage dans un dense tissu urbain, le champ captant de Thil-Gamarde est soumis à de fortes pressions anthropiques. Plusieurs foyers potentiels de pollutions ont été désignés par Caballero (2007) dans le document de la déclaration d'utilité publique de 2007 (Figure 4.5).

Bien que les foyers de pollution ne soient pas forcément directement en contact avec l'aquifère oligocène exploité, de nombreuses zones à risques sont présentes sur le bassin versant de la Jalle et de ses affluents traversant le champ captant de Thil-Gamarde (Ruisseau du Monastère et de Ste Christine). De nombreuses zones industrielles, stockages d'hydrocarbures, décharges, rejet de réseau pluvial, *etc* sont présentes sur le bassin versant de la Jalle (Figure 4.5). Le champ captant est alors susceptible d'être contaminé par drainance depuis les aquifères en présence au droit des potentiels foyers de pollutions mais également par échange nappe-rivière entre la Jalle, ses affluents et l'aquifère oligocène.

Dans l'historique des pollutions rencontrées sur les ouvrages AEP du champ captant, de fortes concentrations en éther éthylique tertiobutyle (ETBE), un additif pour carburant, ont été retrouvées dans les eaux de la galerie de Gamarde en juin 2009 (Safege, 2009b). Cette pollution aurait pour origine une station service présente à moins d'1 km au sud de la galerie de Gamarde et se serait propagée directement à travers l'aquifère oligocène et par le ruisseau Ste Christine (Safege, 2009b).

Le champ captant de Thil-Gamarde a également fait l'objet, durant l'été 2011, d'une première alerte de pollution au perchlorate sur les ouvrages AEP de Thil et de Gamarde. Des concentrations en ions perchlorates ont été mesurées en différents points du champ captant de Thil-Gamarde allant jusqu'à environ  $100 \mu\text{g L}^{-1}$  (Safege, 2012). Les concentrations maximales mesurées dans les ouvrages AEP sont d'environ  $40 \mu\text{g L}^{-1}$ , pour les trois ouvrages actifs du champ captant (Figure 4.6). Les concentrations maximales relevées en rivière sont également de  $40 \mu\text{g L}^{-1}$ . On note une diminution constante de la concentration en perchlorate dans les ouvrages AEP R21 et Galerie en accord avec la diminution des concentrations en rivière. L'ouvrage AEP R20 conserve de faibles concentrations en perchlorate, souvent inférieures au seuil de détection, hormis pour quelques événements.

Toxique, l'ion perchlorate est un perturbateur endocrinien. En France, l'Agence nationale de sécurité sanitaire de l'alimentation, de l'environnement et du travail (Anses) fixe en 2011 des restrictions de consommation (Anses, 2011) :

- à partir de  $4 \mu\text{g L}^{-1}$  de perchlorates pour les nourrissons de moins de 6 mois ;
- au-delà de  $15 \mu\text{g L}^{-1}$  de perchlorates pour les femmes enceintes et allaitantes ainsi que pour les autres individus ;

Le perchlorate d'ammonium,  $\text{NH}_4\text{ClO}_4$ , est un composé inorganique extrêmement soluble dans l'eau (Solubilité du perchlorate d'ammonium :  $200 \text{ g L}^{-1}$  (Ashford,

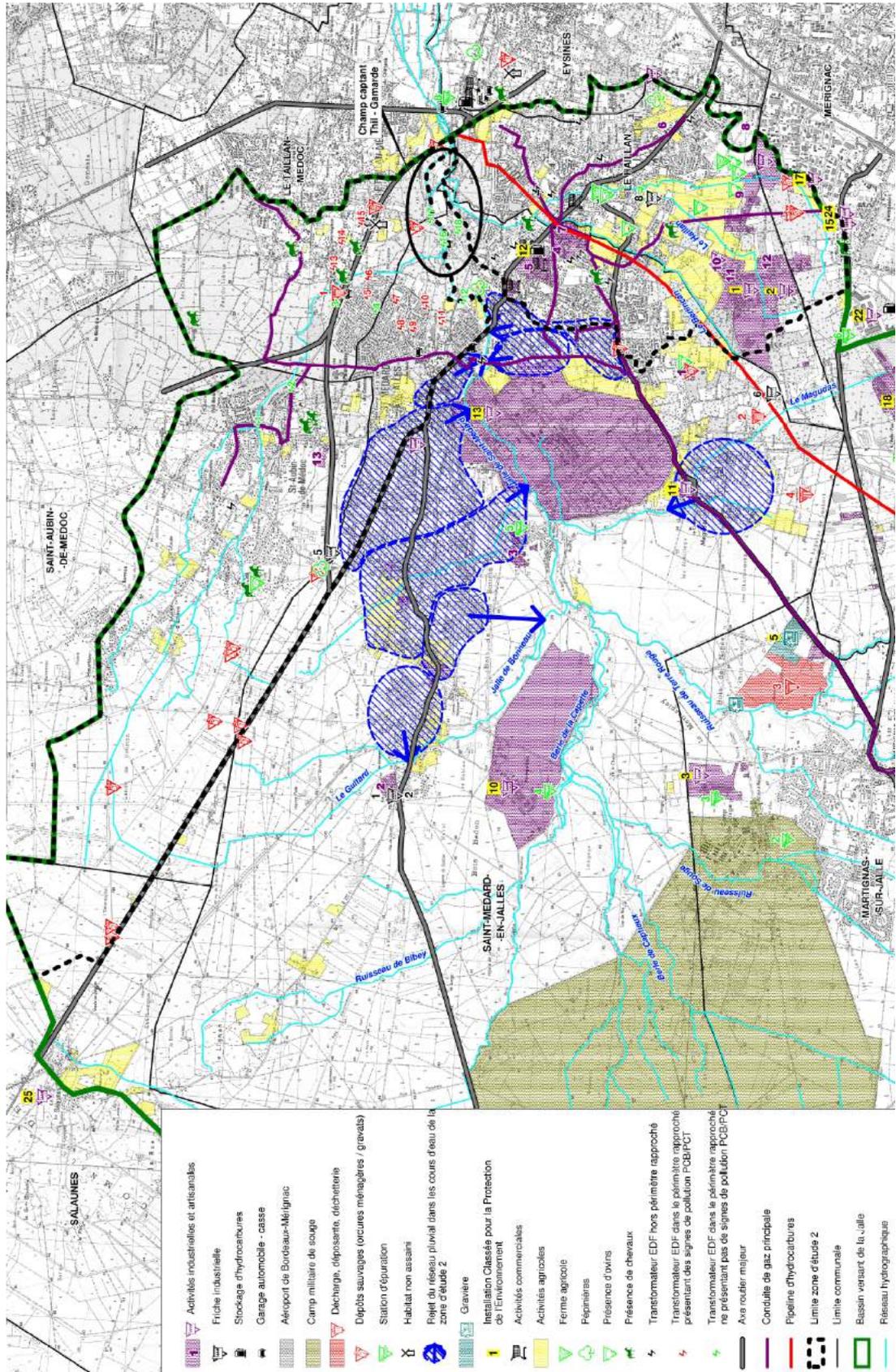
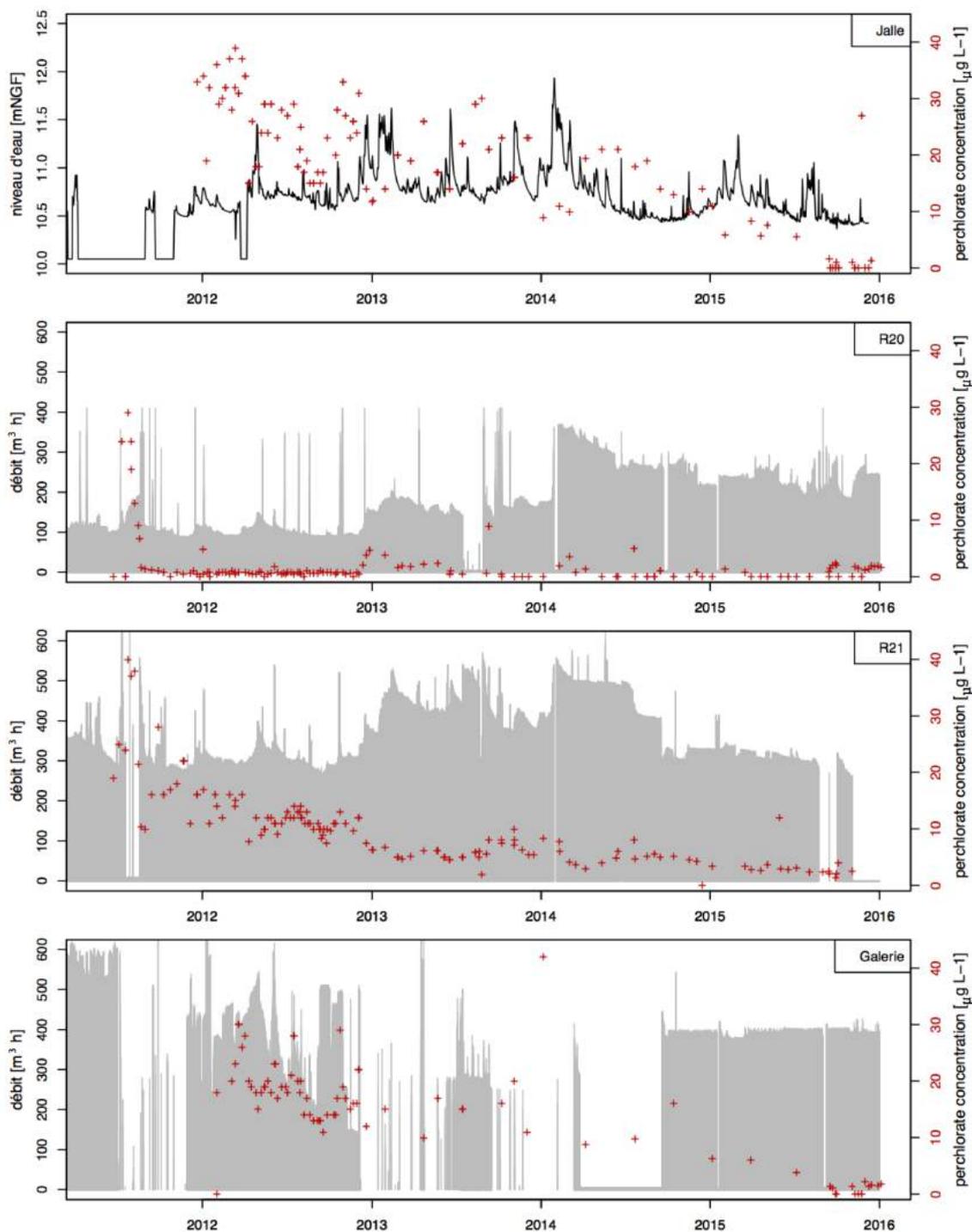


Figure 4.5 : Foyers potentiels de pollution identifiés d'après Caballero (2007)

#### 4. ÉCHANGES NAPPE-RIVIÈRE À L'ÉCHELLE INTERMÉDIAIRE : LE CHAMP CAPTANT DE THIL-GAMARDE



**Figure 4.6 :** Concentrations en perchlorate  $\mu\text{g L}^{-1}$ , débit et niveau associés dans les ouvrages AEP et la Jalle au niveau du champ captant de Thil-Gamarde

1994). Le perchlorate est généralement utilisé comme un oxydant solide pour les systèmes de propulsion de missiles, bombes et munitions ainsi que pour la confection de réacteurs de fusées. De ce fait, les concentrations les plus importantes de perchlorate mesurées se trouvent souvent dans des zones d'activité industrielles en particulier l'industrie d'armement et aérospatiale. On en retrouve également dans les anciennes zones de guerre, bombardées où des munitions peuvent encore être enterrées.

Le perchlorate d'ammonium se dissocie au contact de l'eau en deux ions : le perchlorate ( $\text{ClO}_4^-$ ) et l'ammonium ( $\text{NH}_4^+$ ). L'ammonium n'étant pas toxique, nous nous intéressons ici exclusivement à l'ion perchlorate. Selon la littérature, l'ion perchlorate est un élément très mobile et très stable dans l'environnement aqueux (Jackson et al., 2004). De plus il n'est pas adsorbé de manière significative dans les sédiments ou la matière organique (INERIS, 2014). La combinaison de la forte solubilité, de la faible adsorption du perchlorate font que les panaches de pollution sont souvent grands, persistants et difficiles à supprimer (Trumpolt et al., 2005).

La présence de perchlorate dans l'eau des ouvrages du champ captant de Thil-Gamarde peut avoir plusieurs origines :

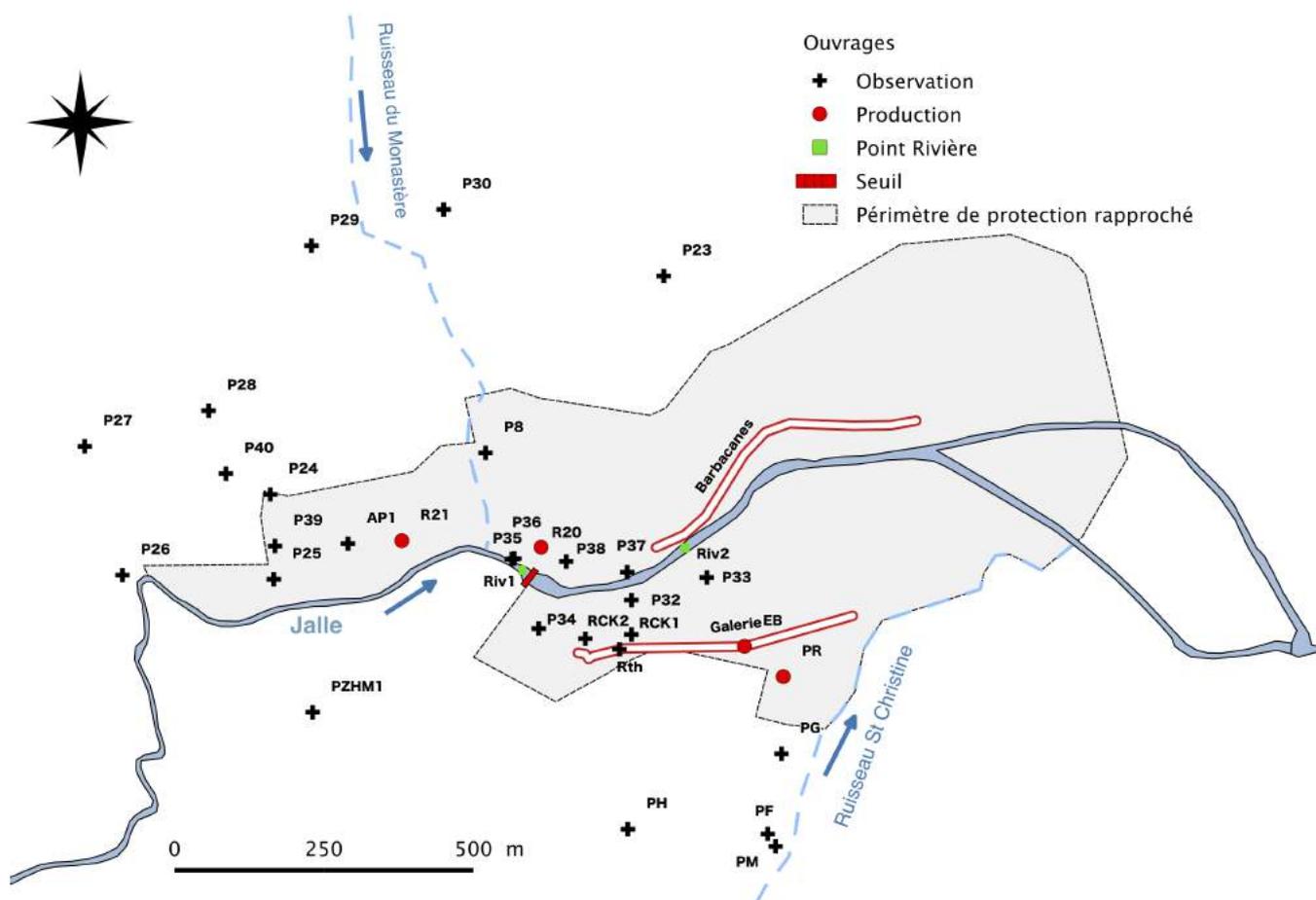
- la Jalle : en effet en amont du champ captant de Thil-Gamarde la Jalle draine des terrains pollués au perchlorate d'ammonium (Safege, 2012) (plusieurs milliers de  $\mu\text{g L}^{-1}$  dans les eaux de l'aquifère miocène en présence). La modification du sens d'échange au droit du site créé par l'exploitation de la ressource en eau peut alors entraîner une contamination de l'aquifère en relation directe avec la Jalle ;
- des munitions enfouies dans le sous sol : le site de Thil-Gamarde a été un lieu de stockage militaire lors de la seconde guerre mondiale (Tauzia, 2015), des résidus d'armement pourraient toujours être lessivés et s'écouler dans l'aquifère.

La continuité hydraulique entre les eaux de surface et les eaux souterraines au droit du champ captant de Thil-Gamarde implique que : le développement ou la contamination de l'une des deux entités peut affecter l'autre (Sophocleous, 2002), et ce, notamment dans un contexte de prélèvement d'eau dans la zone riparienne (proche rivière) (Woessner, 2000).

Bien que les perchlorates soient la source majeure de pollution du champ captant, les recherches porteront principalement sur la vulnérabilité du champ captant face au vecteur de pollution rivière dans son ensemble.

## 4.4 Caractérisation et conceptualisation des écoulements et du transport

L'apport de solutions de gestion de la ressource en eau, vis-à-vis de la problématique de contamination de l'aquifère par les eaux de surface, passe par une phase



**Figure 4.7 :** Carte des ouvrages d'observation et de production du champ captant de Thil-Gamarde

préliminaire de compréhension et de caractérisation du système au travers de la conceptualisation des écoulements et du transport.

Dans un système aquifère le transfert de pression et de masse répondent à des sollicitations externes, telles que : la recharge atmosphérique, les prélèvements anthropiques, les échanges avec les entités de surface, *etc.* Le système aquifère réagit à ces sollicitations en fonction des propriétés hydrodynamiques qui le caractérisent, telles que : la transmissivité et le coefficient d'emmagasinement, la dispersion, *etc.* Afin d'établir le modèle conceptuel de l'aquifère étudié, nous cherchons ici à caractériser : i) la dynamique du système aquifère au travers du champ de charge hydraulique ; ii) les différentes sollicitations auxquelles l'aquifère est soumis ; iii) la réactivité de l'aquifère face à ces sollicitations et iv) les propriétés hydrodynamiques du système contraignant les transferts de pression et de masse. La caractérisation de ces processus et propriétés passe par l'analyse de données et de rapports existants, la mise œuvre d'un suivi d'observation et l'acquisition de données hydrogéologiques, hydrogéophysiques et hydrogéo-chimiques au cours de travaux de terrain. L'ensemble est décrit dans cette section en s'appuyant sur la Figure 4.7 comme référence géographique.

## 4.4.1 Hydrologie

### 4.4.1.1 Débits de production des ouvrages

Les débits de production de l'ensemble des ouvrages d'exploitation du site ont été fournis par Suez Environnement au pas de temps 5 minutes. Il s'agit des débits de production des ouvrages R20, R21, Galerie et Barbacanes, ils sont également représentés dans sur la figures 4.10.

### 4.4.1.2 Précipitations

Les données de la station de Mérignac, gérée par Météo France, se situant à environ 7 km de la zone d'étude nous ont été fournies (source climathèque Météo-France). L'ensemble des données de précipitation sont fournies par Météo-France (Centre National de Recherches Météorologiques, CNRM).

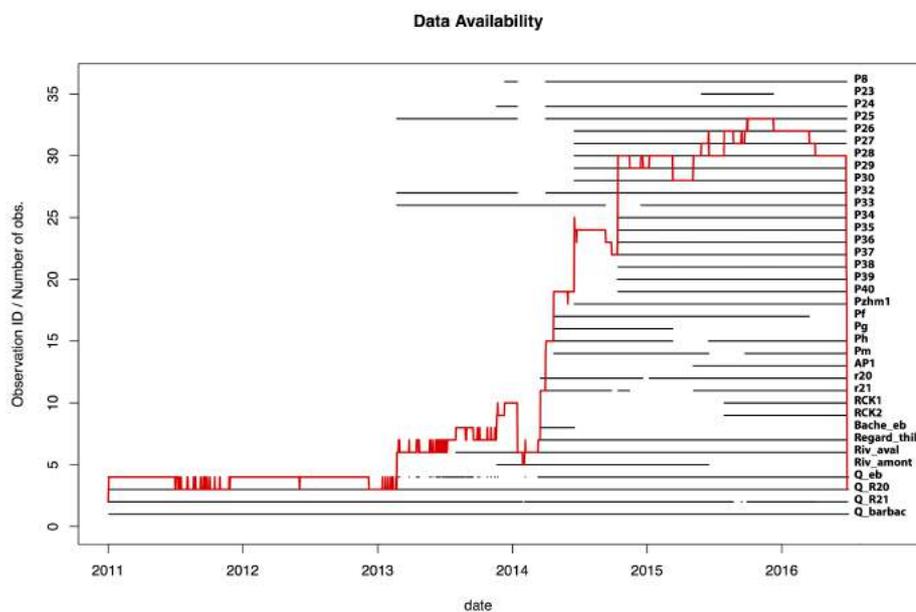
### 4.4.1.3 Suivi de la pression en nappe

Nous avons équipé, entre 2013 et 2015, l'ensemble des puits d'observation et des ouvrages de prélèvement en état ainsi que deux points en rivière, avec des sondes de pression et de température autonomes mini-DIVER (Schlumberger®) qui enregistrent la pression et la température toutes les 6 minutes (Figure 4.7). Deux sondes mini-BARO (Schlumberger®) émergées ont également été placées dans les puits d'observation P32 et P25 afin de mesurer la température et la pression atmosphérique, permettant de compenser de la pression atmosphérique les mesures de pression immergées.

Suite à une réflexion sur la disponibilité spatiale des observations de charge vis-à-vis des échanges nappe-rivière, nous avons participé, durant le mois de septembre 2014 à la réalisation de nouveaux piézomètres que nous avons également équipé de sonde de pression et de température (P34, P35, P36, P37, P38, P39 et P40 sur la Figure 4.7) L'ensemble des points n'a pas été équipé simultanément, et certaines périodes sont manquantes sur plusieurs points. La Figure 4.8 permet de rendre compte de la disponibilité en chaque point et de l'ensemble des données disponibles.

Nous avons nivelé l'ensemble des ouvrages à l'aide d'un GPS différentiel Leica® GS-08 raccordé à une antenne fixe de Bordeaux Métropole présente à environ 10 km de la zone d'étude. Une fois traitées, les données GPS obtenues nous fournissent l'altitude en m NGF du haut de chaque tubage avec une précision centimètre. Par la suite l'ensemble des chroniques piézométriques en m NGF a pu être obtenu. Les chroniques de précipitation, le niveau d'eau en rivière, le niveau d'eau dans deux piézomètres (P24 et P34), le niveau d'eau dans les 3 ouvrages de production ainsi que leurs débits de production associés sont présentés Figure 4.10.

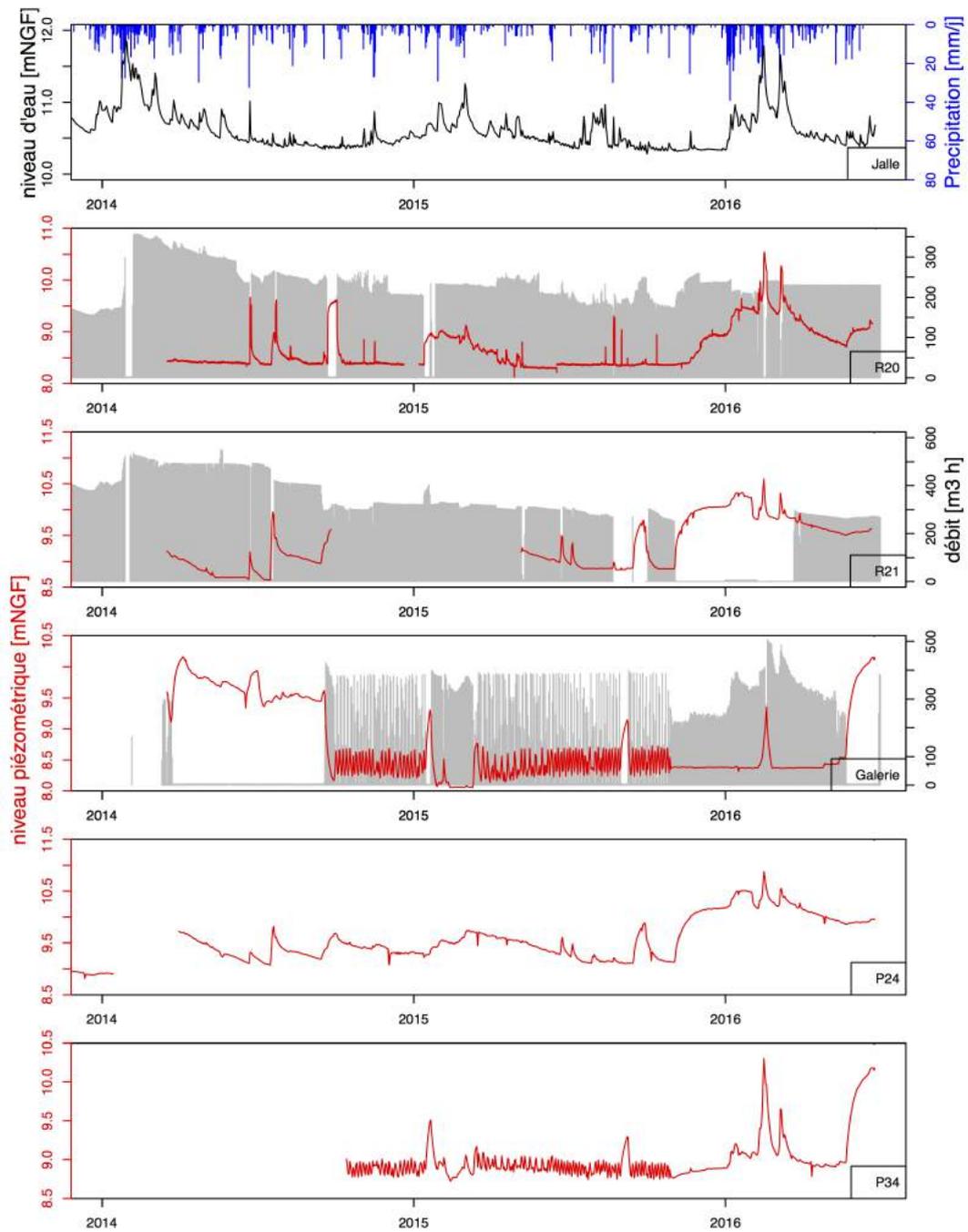
A partir de ces données, une carte piézométrique sur les bases d'enregistrement du 10 octobre 2014 (Figure 4.11) a été réalisée. Nous avons fait l'hypothèse d'une continuité de la pression entre la rivière Jalle et la nappe. Cette carte nous



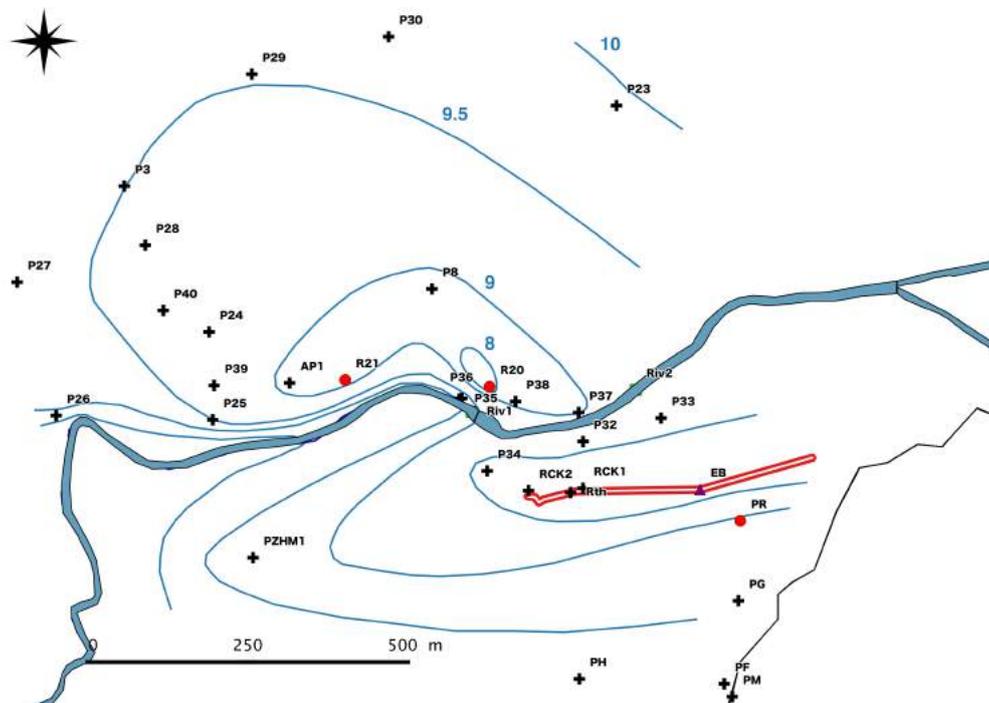
**Figure 4.8 :** Disponibilité des données aux points d’observation du champ captant. En chaque point (noir) et cumulée (rouge)



**Figure 4.9 :** A) Exemple de relevé de sonde DIVER dans un puits (P26) B) nivellement DGPS au abord du l’ouvrage R21



**Figure 4.10** : Chroniques de précipitation, niveau d'eau en rivière, niveau d'eau dans deux piézomètres (P24 et P34), niveau d'eau dans les 3 ouvrages de production ainsi que les débits de pompage associés

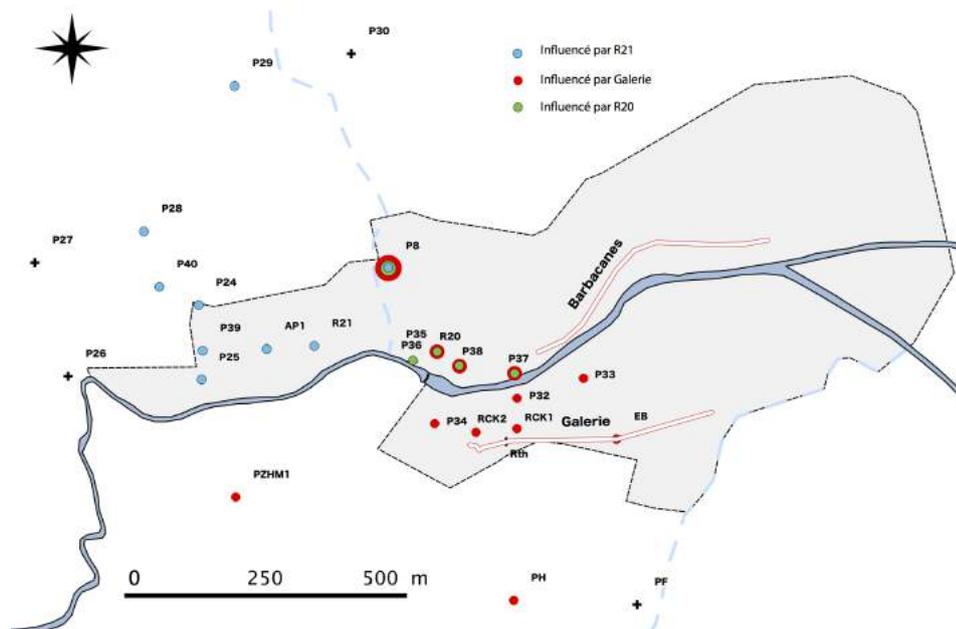


**Figure 4.11 :** Carte piézométrique réalisée à partir des données de sonde DIVER au 10-10-2014

renseigne sur les directions générales des écoulements ainsi que sur l'influence des différents "objets" du champ captant (rivière, ouvrages de production, seuil, etc).

Les écoulements sont principalement contraints par les prélèvements des ouvrages dans l'aquifère et les écoulements de surface (rivière Jalle). La présence du seuil de la Jalle (Figure 4.7) décalant l'altitude du lit de la rivière d'environ 1.2 m a une influence significative sur les écoulements souterrains en créant des gradients hydrauliques importants de part et d'autre du seuil. La rivière Jalle est en condition de perte sur la majorité du champ captant, excepté en aval du seuil ou en rive gauche où l'aquifère alimente la rivière. On remarque également des axes où les gradients hydrauliques sont faibles, révélateurs d'une forte transmissivité de l'aquifère; en rive droite proche dans l'axe des ouvrages de production et au sud de la galerie de Gamarde.

L'analyse des chroniques piézométriques obtenues nous renseigne sur les dynamiques de transfert de pression, mais également sur les propriétés hydrodynamiques de l'aquifère en fonction de la réponse de chaque puits à tel ou tel forçage. On peut ainsi classer chaque ouvrage en fonction de sa réactivité, ainsi les ouvrages peuvent être influencés par les prélèvements dans R21, dans R20, dans la galerie ainsi que par les signaux rivière et recharge. L'identification de chaque ouvrage en fonction de sa sensibilité aux ouvrages de production est répertorié dans la figure 4.12.



**Figure 4.12 :** Classement des ouvrages en fonction de leur réactivité piézométrique

L'ensemble des chroniques piézométriques observées est influencé par le signal rivière, excepté PF, P26, P27 et P30 dont les logs indiquent qu'ils n'atteignent pas l'aquifère oligocène mais restent dans des formations du Plio-Quaternaire. La moindre influence de la rivière sur leur signal piézométrique peut être expliquée par la présence d'argiles atténuant le signal, ou par la distance par rapport à la rivière (PF, P30).

Les ouvrages en rive gauche à l'ouest du R21 réagissent nettement aux différentes sollicitations du puits de production R21. Plus à l'est, les ouvrages réagissent aux sollicitations du puits de production R20 mais également aux prélèvements dans la galerie de Gamarde en rive droite. Le point P8 qui se situe à mi-chemin entre R20 et R21 réagit à ces deux puits de production et dans une moindre mesure aux prélèvements de la galerie de Gamarde. Les puits d'observation en rive droite réagissent aux prélèvements de la galerie de Gamarde.

D'un point de vue hydrodynamique, la forte réactivité de certains ouvrages face aux prélèvements est le signe de fortes transmissivités qui sont à associer avec les faibles pertes de charges observées entre certains points d'observation et de prélèvements (également observés sur la carte piézométrique). De manière générale on observe les axes transmissifs suivants :

- dans le prolongement du puits de prélèvement R21 en direction des ouvrages d'observation AP1, P25, P24, P39, P40, P28, P29 ;
- dans l'axe R20 - P8 ;
- autour de la galerie et dans l'axe galerie - PH.



Figure 4.13 : Essai par pompage sur l'ouvrage P32

A contrario on observe également des zones faiblement transmissives :

- entre le puits d'observation P25 et la rivière où les pertes de charges sont conséquentes ;
- entre le puits d'observation P33 et la rivière ;
- dans l'axe R20 - P38 - P37 ;
- entre les ouvrages de production R20, R21 et la rivière ;

#### 4.4.1.4 Estimation de la transmissivité de l'aquifère

Une série d'essais par pompage a été réalisée entre décembre et avril 2015, dans le cadre d'un projet étudiant que nous avons encadré (Rossi et al., 2015).

Réalisés à débit constant, le rabattement en fonction du temps a été reporté sur un graphique semilog. Les essais par pompage ont été interprétés avec la solution de Cooper-Jacob pour les cas sans présence de limite d'alimentation, avec comme hypothèse que le rabattement reste relativement faible par rapport à l'épaisseur de l'aquifère (inférieur à 10% de l'épaisseur de l'aquifère) et que le milieu est homogène (Kruseman et al., 1990). Cette solution est uniquement valide pour  $u = \frac{r^2 S}{4Tt} \leq 10^{-3}$ . Ainsi, d'après l'équation :

$$s = \left( \frac{Q}{4\pi T} \ln \frac{2.25T}{r^2 S} \right) + \left( \frac{Q}{4\pi T} \right) \ln(t) \quad (4.1)$$

Où  $s$  [L] est le rabattement,  $T$  [ $L^2 T^{-1}$ ] la transmissivité,  $r$  [L] le rayon du puits,  $Q$  [ $L^3 T^{-1}$ ] le débit de pompage et  $t$  [T] la durée du pompage.

Les cas avec présence de limite d'alimentation ont été interprétés avec la solution de Theis, d'après l'équation :

$$s = \frac{Q}{4\pi T} \left( W \left( \frac{4Tt}{r^2 S} \right) - W \left( \frac{4Tt}{S r'^2} \right) \right) \quad (4.2)$$

Où  $r'$  [M] est la distance au puits image. Les valeurs de transmissivités sont résumées :

Ouvrage	T m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup>	Lithologie
P25	$2 \times 10^{-3}$	limon sable noir, calcaire altéré, calcaire plus ou moins fracturé
P27	$4.5 \times 10^{-3}$	sable marron sur marnes
P32	$1.6 \times 10^{-4}$	sable argileux, graviers sable et calcaire sableux avec graviers
P33	$8.5 \times 10^{-4}$	sable brun et sable grossier
PF	$2.3 \times 10^{-3}$	sable fauve jaunâtre, sable blanc
PM	$1.1 \times 10^{-3}$	données indisponibles
PZHM1	$3.2 \times 10^{-3}$	données indisponibles
P8	$7.2 \times 10^{-3}$	données indisponibles

**Tableau 4.1 :** Résultats des essais par pompages

La moyenne des transmissivités estimées est de  $2.6 \times 10^{-3} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ , ce qui fait une conductivité hydraulique moyenne comprise entre 4 et  $9 \times 10^{-5} \text{m s}^{-1}$ . Cependant si l'on prend en compte les valeurs obtenues par les essais réalisés aux ouvrages de production la conductivité hydraulique moyenne serait plus de l'ordre de  $5 \times 10^{-4} \text{m s}^{-1}$ .

#### 4.4.1.5 Estimation de l'anisotropie de l'aquifère

L'anisotropie est le rapport entre la conductivité hydraulique verticale  $K_v$  [

L'anisotropie a été approximée par modélisation inverse d'une section de l'aquifère traversée par la rivière et le dispositif en flûte de pan, avec l'hypothèse d'un milieu homogène. Les paramètres géométriques et hydrodynamiques proviennent des mesures de terrain décrites dans ce chapitre, avec une valeur de conductivité hydraulique de  $5 \times 10^{-4} \text{m s}^{-1}$  pour l'aquifère et le lit de la rivière. La section d'aquifère est simulée avec le code de calcul SUTRA (Voss, 1984) et le maillage produit par le mailleur d'éléments finis Gmsh (Geuzaine and Remacle, 2009), les fichiers d'entrée et de sortie étant générés à l'aide d'un script Python. Un modèle analogue à celui décrit dans l'article (Cousquer et al., 2017) a été utilisé en appliquant un gradient hydraulique entre la rivière et la nappe identique à celui mesuré sur le terrain. Le niveau piézométrique mesuré dans le dispositif en flûte de pan le même jour a été reproduit en faisant varier l'anisotropie renseignée dans le modèle (Figure 4.15). On observe (Figure 4.16) la répartition des isolignes de charge hydraulique en mètre, et ainsi la convergence des flux à proximité de

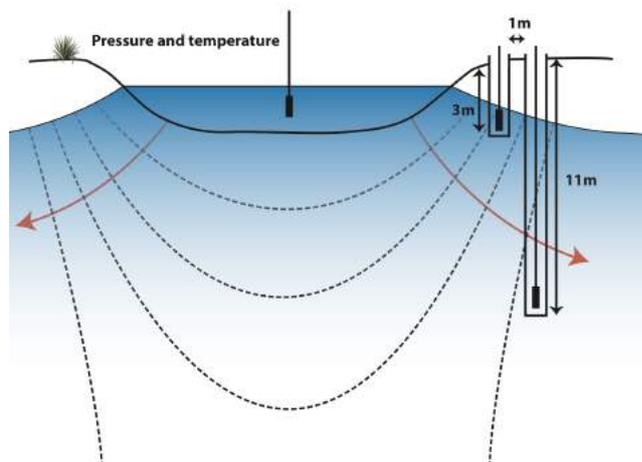


Figure 4.14 : Dispositif des piézomètres en "flute de pan"

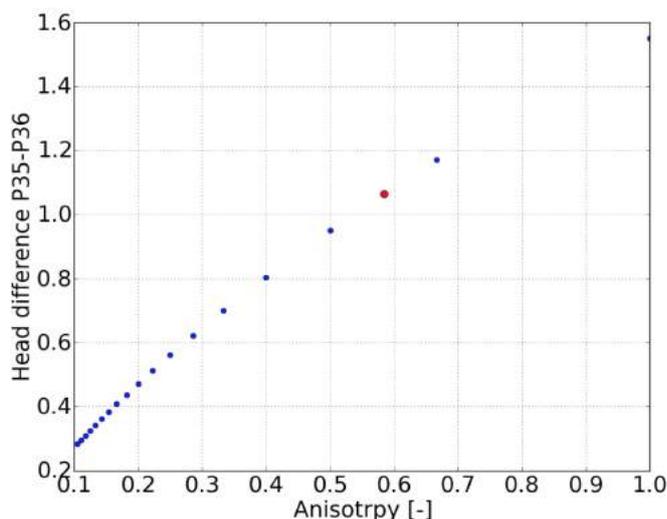


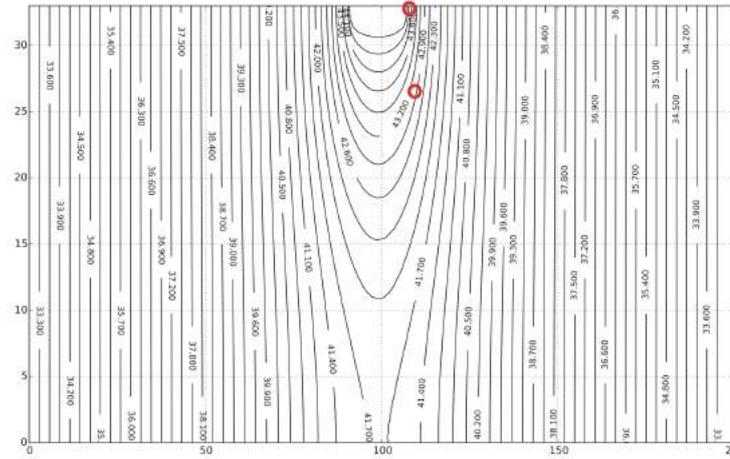
Figure 4.15 : Différence de charge entre P35 et P35 en fonction de l'anisotropie

la rivière permettant d'obtenir la bonne valeur d'anisotropie en reproduisant la différence de charge mesurée dans le dispositif en "flûte de pan".

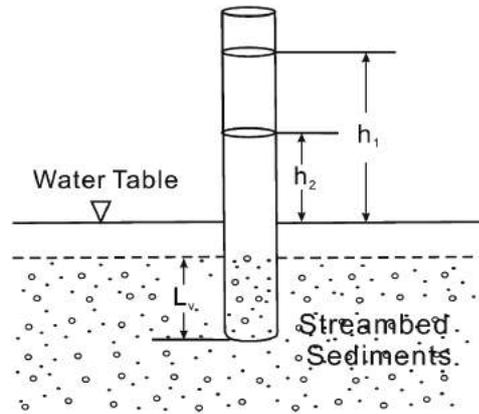
La différence de cote piézométrique entre les puits P35 et P36 est de 1.07 m, l'anisotropie est ainsi estimée à 0.6 ( $K_v/K_h$ ).

#### 4.4.1.6 Estimation des propriétés hydrodynamiques du lit de la rivière

Les propriétés hydrodynamiques du lit de la rivière, et notamment sa conductivité hydraulique verticale fait partie des paramètres les plus influents sur les flux nappe-rivière échangés (Cousquer et al., 2017; Morel-Seytoux, 2009; Rush-ton, 2007). Ce paramètre peut être estimé au moyen de tests de perméabilité *in-situ*. Cheng et al. (2011) proposent un dispositif de mesure, comprenant un perméamètre à enfoncer verticalement dans les sédiments du fond de la rivière



**Figure 4.16** : Modèle permettant d'estimer l'anisotropie en fonction des observations faites dans les piézomètres en flûte de pan



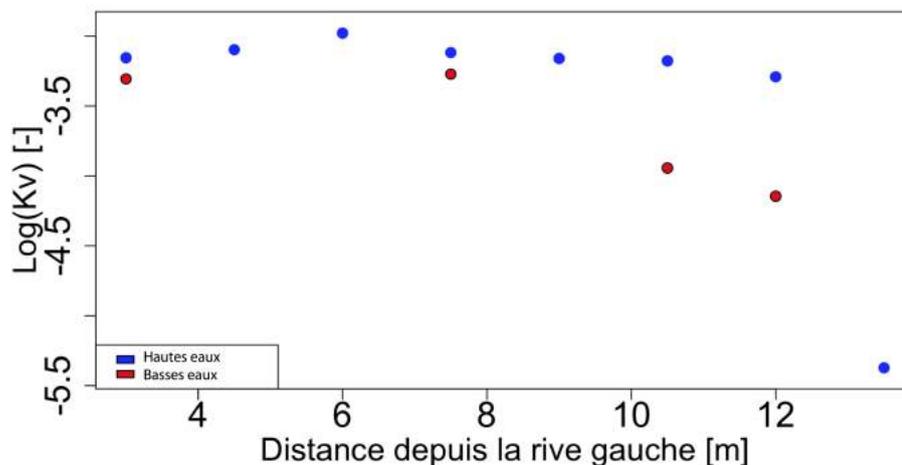
**Figure 4.17** : schéma du perméamètre in-situ pour déterminer la conductivité hydraulique verticale du lit de la rivière d'après Cheng et al. (2011)

(Figure 4.17). Après avoir enfoncé le tube dans les sédiments d'environ 30 cm, de l'eau est ajoutée dans le tube depuis le haut. La charge hydraulique dans le tube descend et est enregistrée sur différents pas de temps. La conductivité hydraulique est ensuite déduite de l'équation de Hvorslev (Hvorslev, 1951) :

$$K_{vb} = \frac{\pi D}{11m} + L_v \ln \left( \frac{h_1}{h_2} \right) \quad (4.3)$$

Où  $L_v$  [L] est la profondeur de pénétration du tube dans les sédiments (ici 30 cm),  $h_1$  et  $h_2$  [L] sont les charges mesurées respectivement aux temps  $t_1$  et  $t_2$  [T],  $D$  [L] est le diamètre interne du tube et  $m = \sqrt{K_{hb}/K_{vb}}$  avec  $K_h$  [L T<sup>-1</sup>] la conductivité hydraulique horizontale moyenne des sédiments entourant le tube. D'après Cheng et al. (2011)  $m$  peut être choisi arbitrairement car il n'influence que peu la valeur estimée de  $K_{vb}$ .

Nous avons réalisé ce protocole de mesure sur plusieurs points, le long d'un tron-



**Figure 4.18** : Log de la conductivité hydraulique, en hautes et basses eaux, sur un transect de rivière face à l'ouvrage P35

çon de rivière face au piézomètre P35. Les mesures ont été réalisées deux fois, en hautes et basses eaux, afin d'estimer l'éventuelle variabilité de conductivité hydraulique du lit de la rivière au cours de l'année (Figure 4.18).

On observe une légère diminution des conductivités hydrauliques mesurées en période de basses eaux 4.18, sans doute induite par des vitesses d'écoulement plus faibles favorisant les dépôts de sédiment moins perméables (argiles), ce phénomène est également à l'origine des faibles conductivités hydrauliques retrouvées à proximité des berges.

La moyenne arithmétique de conductivité hydraulique du lit de la rivière est estimée à  $5 \times 10^{-4} \text{m s}^{-1}$ , cette valeur est équivalente à la conductivité hydraulique moyenne de l'aquifère.

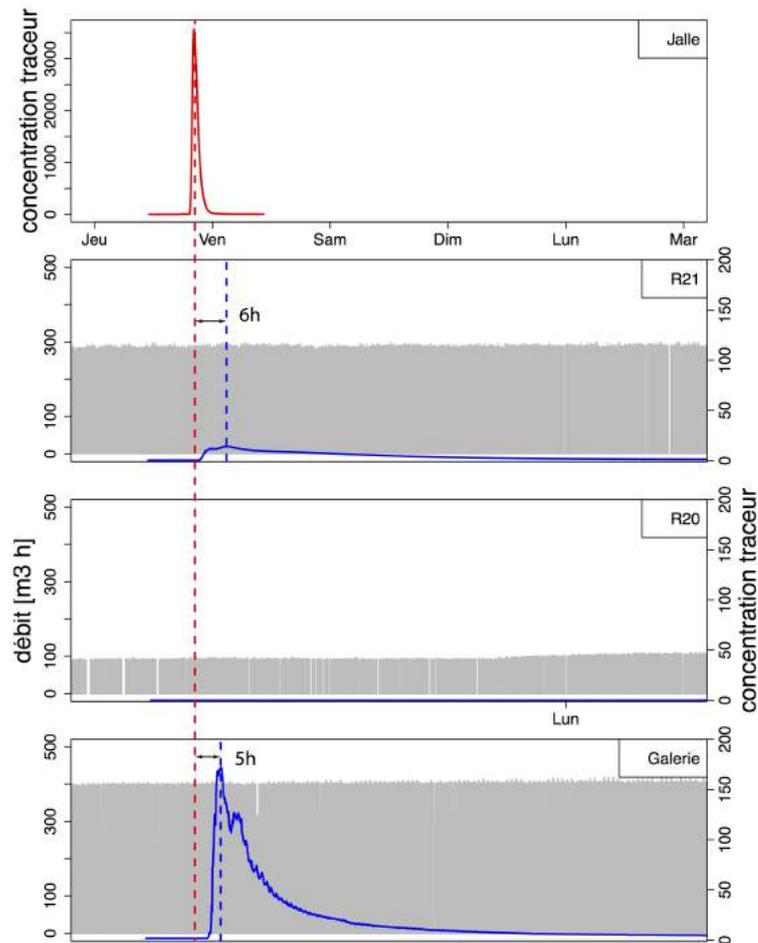
## 4.4.2 Hydrochimie

Trois campagnes géochimiques, deux en basses eaux et une en hautes eaux ont été réalisées dans le cadre de cette thèse et du post-doctorat de Célestine Delbart. Les méthodes et résultats méritent d'être présentés ici, car ces données ont été utilisées dans la suite de cette étude. L'ensemble des ouvrages d'observation et de production a été échantillonné dans le but de caractériser les échanges nappe-rivière. Deux traçages artificiels ont également été conduits par Suez Environnement.

### 4.4.2.1 Traçages

Deux principaux traçages à la fluorescéine ont été réalisés par Suez Environnement et Safege (Safege, 2012) :

- le 22-03-2012, avec comme lieu d'injection la rivière Jalle, légèrement en aval du P26. Il avait pour but de caractériser les échanges nappe-rivière

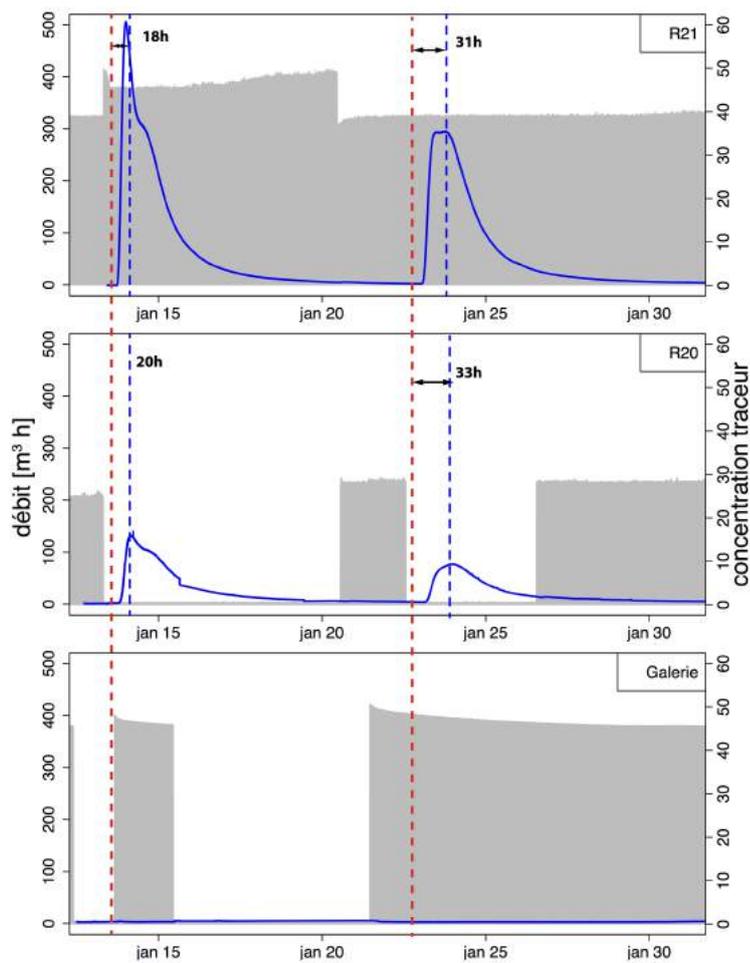


**Figure 4.19** : Traçage depuis la Jalle (point source) au 22-03-2012

vis-à-vis des puits de production (Figure 4.19) ;

- les 13-01-2015 et 22-01-2015 avec comme point d'injection le piézomètre P24. Il a eu pour but de caractériser les échanges entre la zone aquifère du P24 et les ouvrages de production (Figure 4.20).

Ces traçages mettent en avant la forte connexion existante entre la Jalle et la Galerie et dans une moindre mesure vis-à-vis de l'ouvrage R21 et quasi-inexistant avec le R20. Ils indiquent également des temps de transfert très courts au sein de l'aquifère où le traceur met respectivement 20 h pour parcourir environ 450 m et 230 m entre P24 et R20, R21, et 5h pour parcourir environ 500m entre la Jalle et la Galerie (Figure 4.21). Les vitesses de transfert sont rapides mais ne sont cependant pas proportionnelles à la distance entre les différents ouvrages, signe d'une hétérogénéité dans les vitesses d'écoulements.



**Figure 4.20 :** Traçage depuis le piézomètre P24 (point source) les 13-01-2015 et 22-01-2015 (barre rouge)

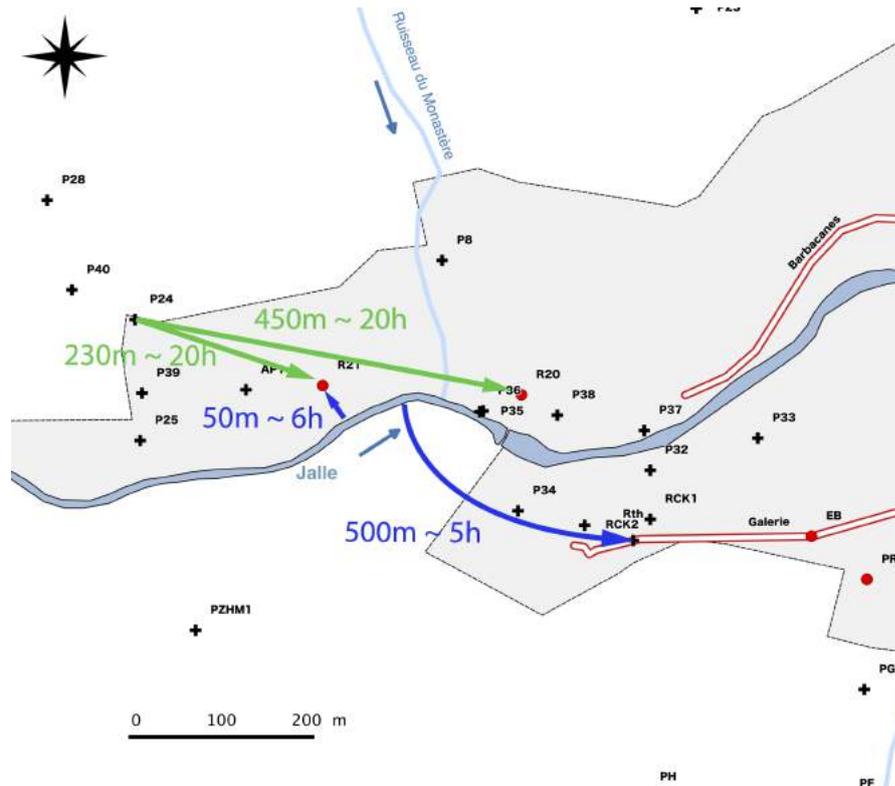


Figure 4.21 : Temps de transfert moyen estimé à partir des traçages

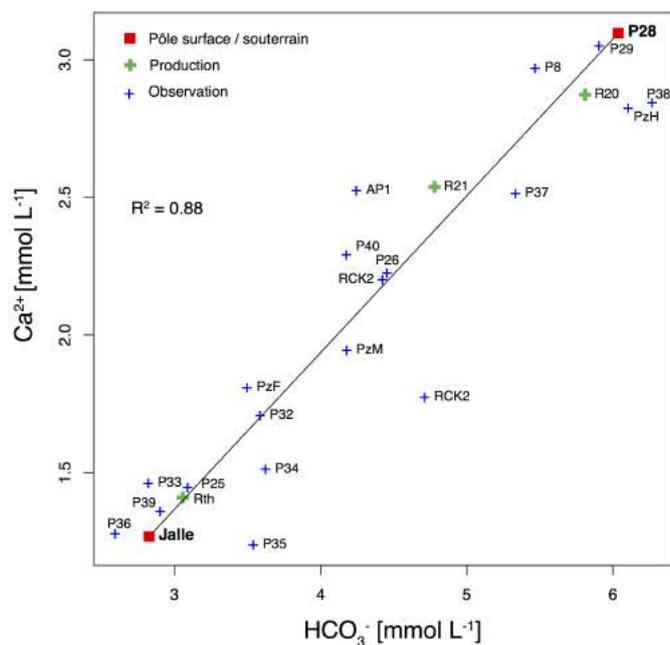
#### 4.4.2.2 Calcul des rapports de mélange eau de surface - eau souterraine

Trois campagnes géochimiques ont été réalisées en octobre 2014 et en avril et octobre 2015.

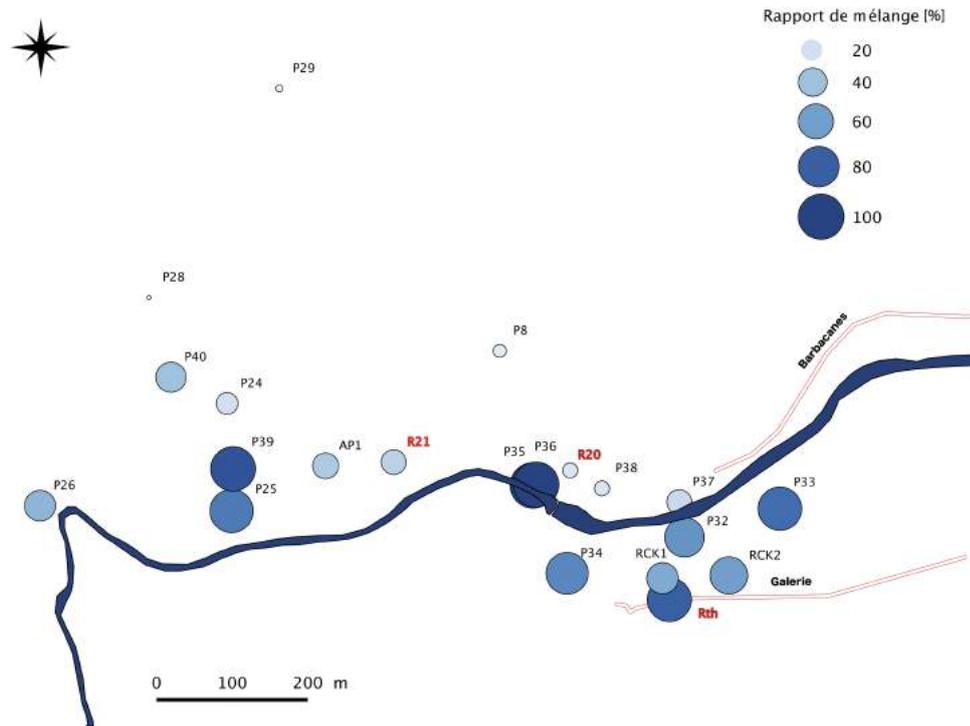
Un modèle géochimique de mélange entre les eaux de la rivière et les eaux souterraines basé sur les concentrations en ions  $\text{Ca}^{2+}$  et  $\text{HCO}_3^-$  a été réalisé pour chaque campagne par projection des valeurs des couples  $\text{Ca}^{2+}$  et  $\text{HCO}_3^-$  aux points de mesure sur la droite de mélange reliant les pôles surface et souterrain (Carrera et al., 2004). Un pôle d'eau de surface est défini à partir de l'eau de rivière et un pôle considéré comme souterrain avec l'eau de l'ouvrage P28. Les rapports de mélange  $\text{Ca}^{2+} - \text{HCO}_3^-$  des eaux prélevées aux différents points d'observation et de production sont comparés à la droite de mélange modélisée (Figure 4.23 pour la campagne d'octobre 2015). A partir du modèle de mélange, le rapport de mélange eau de surface - eau souterraine est estimé pour l'ensemble des ouvrages échantillonnés du site (Figure 4.24). Il est important de noter que les rapports de mélange pour l'ouvrage Galerie ont été réalisés à partir du point Rth, l'eau qui arrive au point Rth ne représente qu'une part faible de l'eau produite par l'ouvrage Galerie puisque le pompage est effectué au niveau du point EB.



**Figure 4.22 :** Échantillonnage d'eau pour la mesure de la composition géochimique au niveau du seuil de la Jalle



**Figure 4.23 :** Rapport de mélange ( $\alpha$ )  $\text{Ca}^{2+}$  -  $\text{HCO}_3^-$  des eaux prélevées et modèle de mélange entre le pôle surface (Jalle) ( $\alpha = 1$ ) et le pôle souterrain (P28)( $\alpha=0$ )



**Figure 4.24 :** Rapport de mélange déduit du modèle de mélange  $\text{Ca}^{2+} - \text{HCO}_3^-$  pour la campagne d'octobre 2015, où le rapport de mélange  $\alpha$  [%] représente le pourcentage d'eau de surface

### 4.4.3 Géomorphologie

La géomorphologie de la zone d'étude est essentiellement marquée par l'incision des formations géologiques par les différents cours d'eau : la Jalle, le ruisseau St Christine et le ruisseau du Monastère, et le comblement de ces incisions par des alluvions. Seule la rivière Jalle coule de façon permanente. Le ruisseau Ste Christine coule pendant une majeure partie de l'année et le ruisseau du Monastère ne coule qu'en cas d'évènements pluvieux exceptionnels. Habituellement, celui-ci se perd environ 2km au nord du site. Cependant la topographie (Figure 4.25) montre clairement le tracé de ce cours d'eau ainsi qu'un alignement morphologique parallèle à la faille de Bordeaux à l'est du point P8.

Bien que le cours d'eau ne coule que très rarement, un réseau de fractures souligné par la topographie, doit permettre un écoulement préférentiel des eaux le long du ruisseau. Par fortes pluies le réseau de fracture se met en charge et permet l'écoulement en surface du ruisseau du Monastère. Des formations karstiques ont également été rencontrées sur la "bute" topographique à l'est du point P8 (Figure 4.26).

Des investigations réalisées en avril 1990 ont mis en évidence une série de conduits karstiques, dans la zone proche de la galerie de Gamarde et en relation directe avec celle-ci (Seguin, 1990) (Figure 4.27).

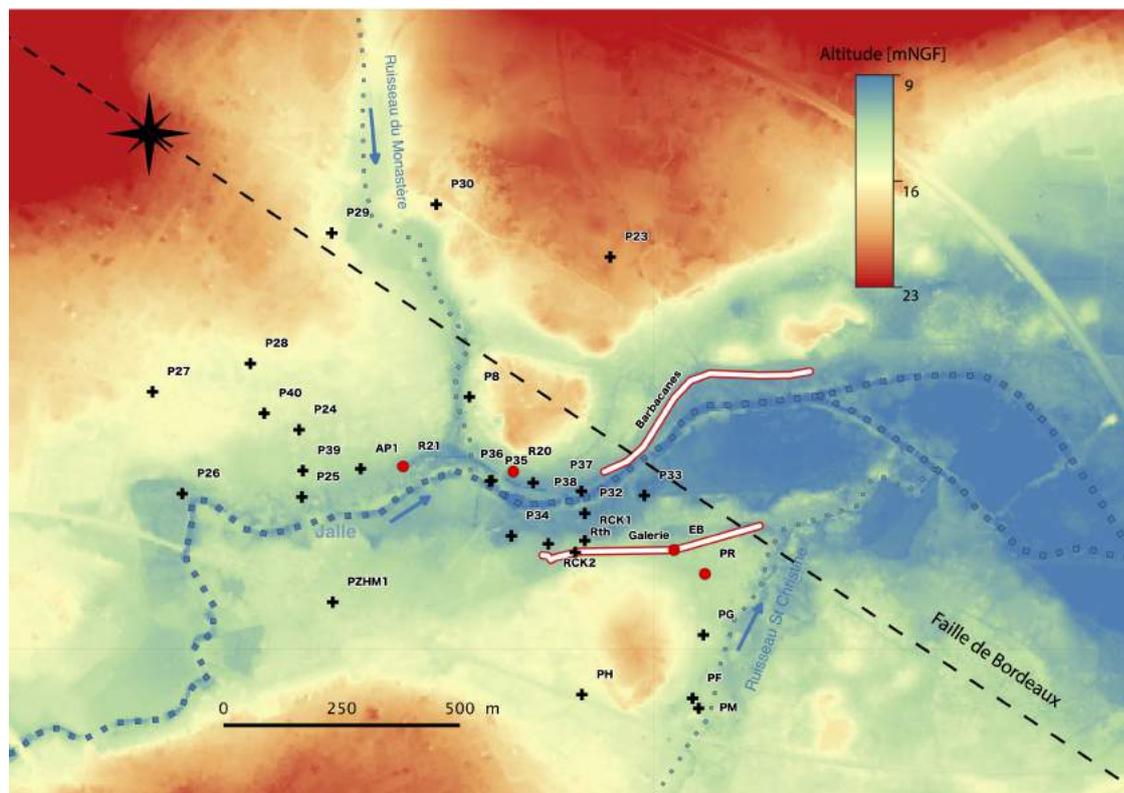


Figure 4.25 : MNT de la zone d'étude de résolution 5m, d'après RGE ALTI®(ign)

#### 4.4.4 Géophysique

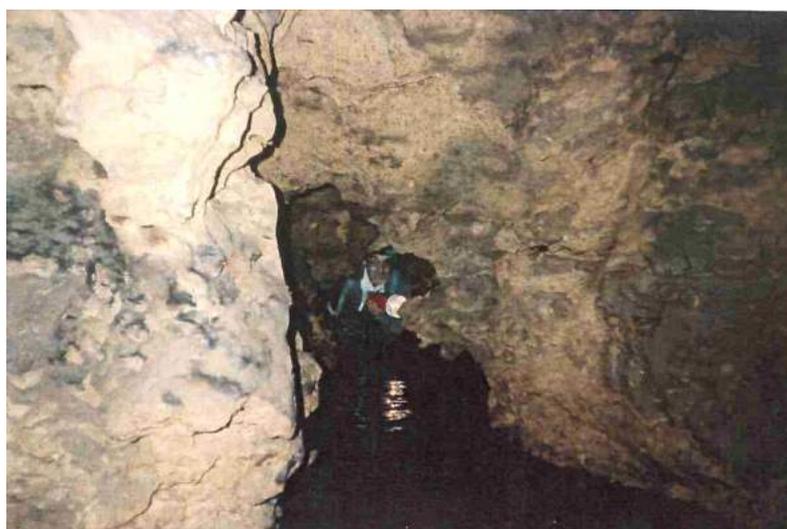
Une série de campagnes géophysiques a été menée dans le cadre du projet dans lequel s'inscrit cette thèse. Elles ont eu pour but de caractériser les structures géologiques responsables des hétérogénéités d'écoulement observées à l'échelle du site. La méthode géoélectrique électromagnétique (EM31) et la tomographie de résistivité électrique (ERT) ont été effectuées. Cette section s'appuie principalement sur les travaux de post-doctorat de Rémi Valois.

##### 4.4.4.1 Prospection électromagnétique (EM31)

L'EM31 est constitué de deux bobines, l'une est émettrice et l'autre réceptrice. Le passage d'un courant électrique alternatif dans la bobine émettrice crée un champ magnétique, le passage de ce champ à travers le sous sol crée alors un courant induit générant un champ magnétique secondaire mesuré par la bobine réceptrice (McNeill, 1980). Ce dispositif permet de mesurer la conductivité électrique apparente du milieu avec une profondeur d'investigation d'environ 5m. Combinées à des mesures au GPS différentiel, les mesures EM31 effectuées ont permis d'établir une cartographie de la conductivité apparente (Figure 4.29). La localisation des zones couvertes par EM31 s'explique par l'impossibilité de couvrir certaines zones présentant des objets métalliques (forte sensibilité de la méthode aux métaux) mais aussi le tissu forestier parfois trop dense pour effectuer des me-



**Figure 4.26** : Présence de modelés karstiques rencontrés sur le terrain à l'est du point P8, la cavité de taille importante en bas de l'image correspond à l'entrée d'une carrière abandonnée



**Figure 4.27** : Mise en évidence de structure karstique souterraine au niveau du point RCK2 (Seguin, 1990)

sures. Dans l'ensemble le milieu est plutôt résistant, correspondant probablement aux sables et calcaires non saturés de l'Oligocène et du Plio-Quaternaire. Ainsi la galerie de Gamarde est comprise dans une zones résistante ce qui est cohérent avec les calcaires oligocènes, non saturés proches de la surface, qui la constitue. Certaines zones plus conductrices (en bleu) sont susceptibles de correspondre à des formations argileuses également présentes sur la zone, comme par exemple les dépôts argileux provenant de la rivière Jalle correspondant à la zone conductrice à l'est de la carte (Figure 4.29). On notera la présence de zone plus conductrices notamment à l'est du point P8 et l'alignement nord / nord-ouest de l'ouvrage de production R21. On remarquera également le passage de la faille de Bordeaux (pointillés fins Figure 4.29, tel que représenté sur la carte géologique 1/50 000 du BRGM Figure 4.2), traversant le champ captant. Des profils de résistivité électrique traversant les zones conductrices proches des puits R21 et P8 ont alors été réalisés en complément.

#### 4.4.4.2 Tomographie de résistivité électrique (ERT)

La méthode ERT est effectuée au travers de l'injection d'un courant électrique et la mesure de la différence de potentiel à partir d'électrodes plantées dans le sol (?). Cette méthode est réalisée ici à travers une configuration Wenner avec un espacement inter-électrode de 2 m. Les données acquises le long du profil sont ensuite inversées par le logiciel d'inversion Res2dinv (Loke and Barker, 1996) afin d'obtenir un modèle 2D vertical de résistivité électrique.

Les profils ont été réalisés dans le but de caractériser les structures présentes dans les zones conductrices mises en évidence avec l'EM31. Un premier profil a été réalisé dans la zone est du P8 (Figure 4.28).

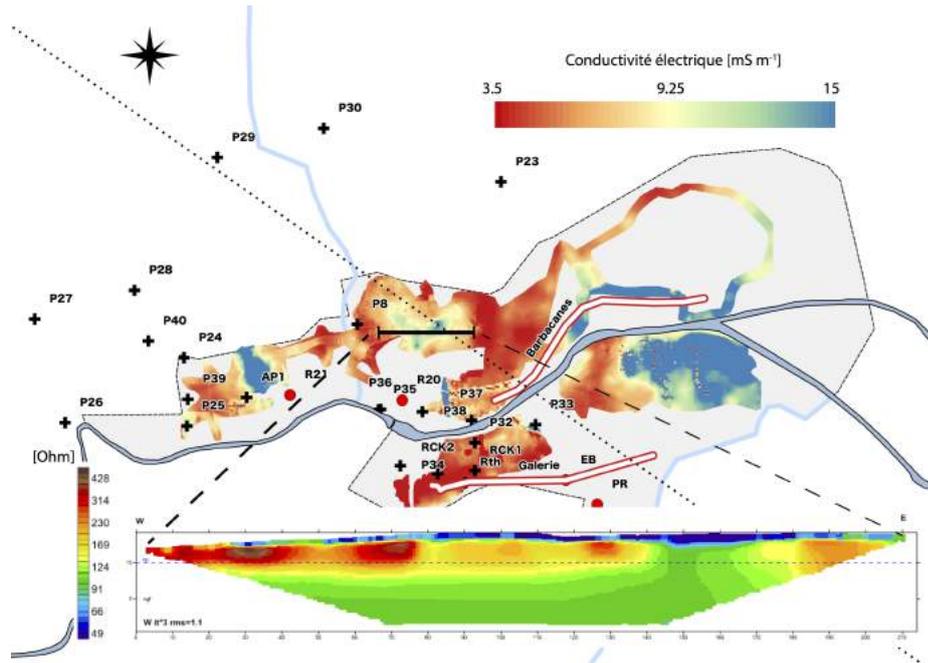
Le profil ERT (Figure 4.28) présente trois couches distinctes :

- une 1<sup>ere</sup> couche conductrice de faible épaisseur  $\sim 2$  m, pouvant correspondre à une zone argileuse ;
- une 2<sup>eme</sup> couche très résistante, caractéristique des calcaires non saturés rencontrés dans la zone, d'une épaisseur d'environ 10 m ;
- Une 3<sup>eme</sup> couche de résistivité moyenne correspond à l'aquifère oligocène saturé.

Une discontinuité est marquée au sein de la 2<sup>eme</sup> couche, lorsque la 1<sup>ere</sup> couche est légèrement plus épaisse. Cette discontinuité est à mettre en relation avec le passage de la faille de Bordeaux, pouvant alors créer des zones de fractures, par la suite comblées par des argiles.

3 autres profils ont été réalisés dans la zone d'anomalie conductrice proche du puits de production R21 (Figure 4.29). Les profils ERT (Figure 4.29) présentent également trois couches distinctes :

- une 1<sup>ere</sup> couche très résistante de faible épaisseur  $\sim 1$  m, correspondant à des sables secs rencontrés sur le terrain ;



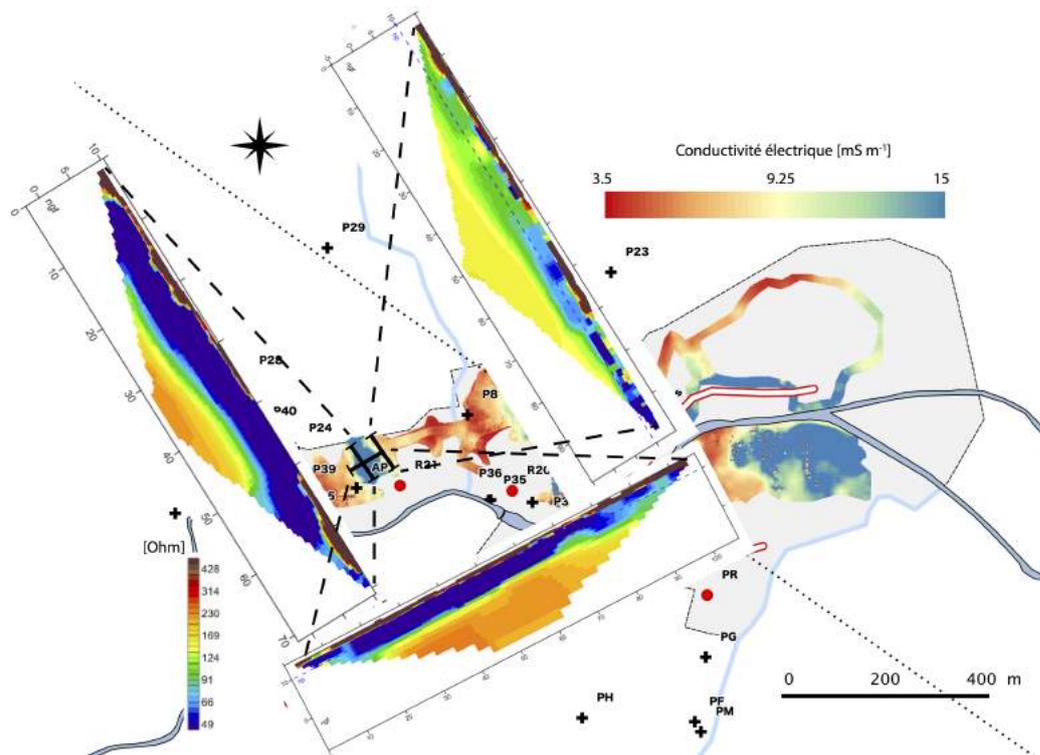
**Figure 4.28 :** Cartographie de conductivité électrique EM31 (les couleurs chaudes représentent les zones de faible conductivité électrique alors que les couleurs froides représentent des zones de forte conductivité électrique). De nombreuses zones n'ont pas pu être investiguées à cause de la présence d'éléments métalliques. Profil de résistivité électrique à travers la zone conductrice à l'est du P8

- une 2<sup>ème</sup> couche conductrice comprise entre  $\sim 5$  et 10 m d'épaisseur, un échantillonnage à la tarière a fait état d'argiles ;
- une 3<sup>ème</sup> couche de résistivité moyenne correspond à l'aquifère oligocène saturé.

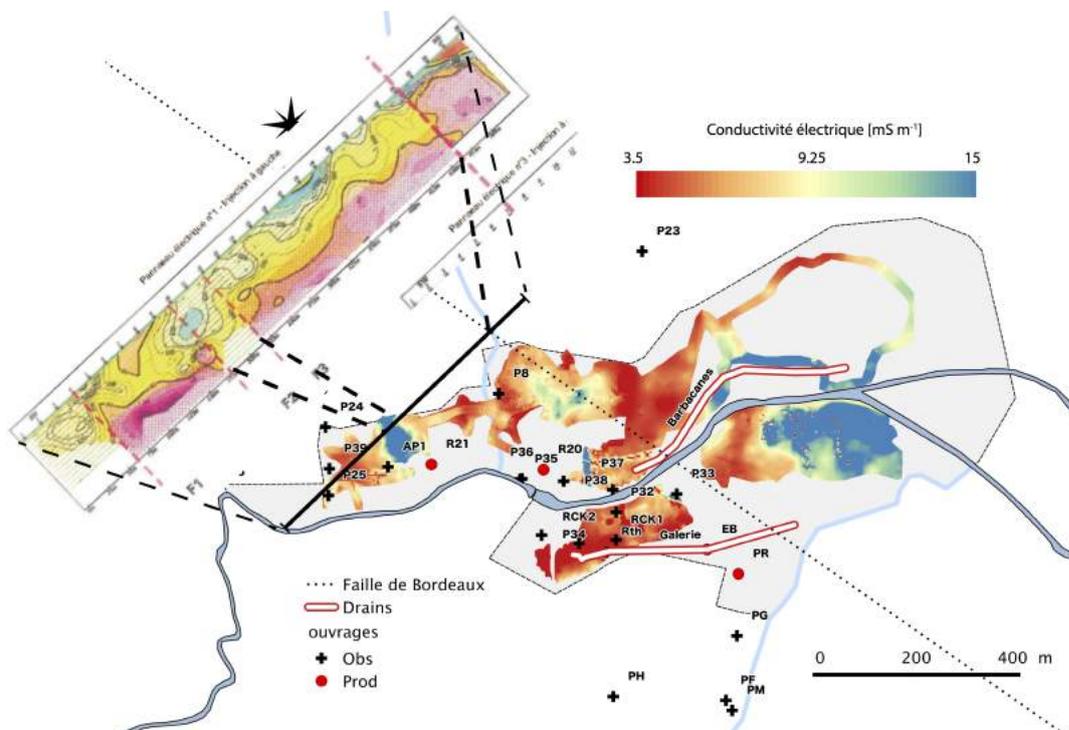
Cet alignement argileux, de direction nord / nord-est, est sans doute lié au passage de failles secondaires à la faille de Bordeaux, également d'alignement nord / nord-est. Cette hypothèse est corroborée par les résultats d'un rapport de la Safege (Safege, 2009a) où une tomographie de résistivité électrique montre un abaissement du mur de l'aquifère oligocène (Figure 4.30).

On remarque une discordance dans la couche conductrice (en violet sur le profil Figure 4.30) associée à l'Oligocène inférieur marneux constitutif du mur de l'aquifère. Cette discordance a lieu dans la même zone conductrice mise en avant avec l'EM31 et les tomographies électriques précédentes. Par un abaissement de la couche oligocène, une couche argileuse serait venue en comblement, expliquant ainsi les zones conductrices retrouvées avec l'EM31 et la tomographie de résistivité électrique (Figure 4.30).

Les ouvrages de production R20 et R21 sont situés dans l'axe de zone conductrice, conséquence d'un comblement de zones faillées/fracturées par des argiles. Potentiellement très transmissives, ces zones fracturées sont sans doute à l'origine des vitesses d'écoulement rapides mises en évidence sur le terrain.



**Figure 4.29** : Cartographie de conductivité électrique EM31 et profil de résistivité électrique à travers la zone conductrice dans l'alignement de l'ouvrage de production R21



**Figure 4.30** : Cartographie de conductivité électrique EM31 et profil de résistivité électrique d'après (Safège, 2009a)

## Synthèse

L'ensemble des données acquises au cours de cette thèse permettent d'établir le modèle conceptuel du champ captant, comportant les points essentiels suivants :

- le champ captant exploite un aquifère libre de sub-surface dans les calcaires de l'Oligocène en continuité hydraulique avec les sables du Plio-Quaternaire ;
- ce champ captant est vulnérable car il est encadré par un tissu urbain et industriel dense comprenant de nombreuses zones à risques. Il est notamment traversé par un cours d'eau, la Jalle, vecteur avéré de pollution ;
- d'un point de vue hydrogéologique, à l'échelle du site, les écoulements sont majoritairement contraints par le niveau de la Jalle (affecté par la présence d'un seuil au centre du site), et par les débits de production des différents ouvrages ;
- les échanges entre les eaux de surface et les eaux souterraines se font naturellement dans le sens nappe-rivière, la présence d'ouvrage de prélèvement vient inverser ce sens d'échange sur les tronçons de rivière proches de ces ouvrages ;
- les propriétés hydrodynamiques de l'aquifère présentent de fortes hétérogénéités à l'échelle du site. Des axes très transmissifs ont été mis en évidence notamment dans l'axe des ouvrages de prélèvement. La présence d'écoulements en conduits (fractures / objets karstiques) a également été mis en avant par des différents traçages artificiels ;
- les observations hydrodynamiques peuvent être expliquées par des observations de terrain mettant en avant la présence de figurés karstiques. La prospection géophysique a également permis d'observer des zones favorables aux écoulements rapides sur plusieurs axes ;
- à partir de la composition géochimique des eaux, les rapports de mélange entre les eaux de surface (Jalle) et les eaux souterraines ont pu être réalisés.



**Troisième partie**  
**Modélisation et calibration**



# Chapitre 5

## Construction du modèle d'échanges nappe-rivière à l'échelle intermédiaire

### 5.1 Introduction

Un modèle d'hydrodynamique souterraine est développé dans le but de protéger la ressource en eau du champ captant de Thil-Gamarde face au vecteur de pollution rivière. Ce chapitre décrit la traduction numérique du modèle conceptuel décrit dans le chapitre précédent. La construction du modèle sera réalisée afin de représenter au mieux l'écoulement de l'aquifère et sa réaction face aux forçages naturels (fluctuation de la recharge météorique, du niveau de la rivière) et anthropiques (variation des débits de production), ainsi que les interactions nappe-rivière d'un point de vue du transfert de pression et de masse. Ce chapitre précède l'étape de calibration du modèle et l'estimation des incertitudes paramétriques et prédictives présentées Chapitre 7. La finalité étant l'utilisation du modèle comme outil d'aide à la décision basé sur des scénarios prédictifs (Chapitre 8).

### 5.2 Approche de modélisation : choix des modèles

Bien que de formation globalement poreuse, l'aquifère à modéliser présente des zones partiellement karstifiées associées à des vitesses d'écoulement rapides détaillées dans le modèle conceptuel présenté au chapitre précédent. Ces régimes d'écoulement se situent en dehors des limites de validité de la loi de Darcy utilisée dans la modélisation des milieux poreux (de Marsily, 1986). Différentes approches permettent de modéliser ce type d'écoulement (Bailly, 2009) et nécessitent souvent de modéliser explicitement un réseau discret de fractures/chenaux. Cela implique une connaissance a priori suffisamment détaillée de la distribution spatiale des fractures. Difficile d'accès et difficile à acquérir à l'échelle de l'aquifère étudié (cf. prospection géophysique Chapitre 4), nous ne disposons pas de cette

information de façon suffisamment détaillée. Bien qu'il soit possible de générer avec succès un réseau stochastique discret de fracture à l'échelle régionale (Jaquet et al., 2004), de fortes incertitudes sur la structure et l'hétérogénéité du réseau généré persistent (Borghini et al., 2012). L'approche du milieu poreux équivalent est donc envisagée, où i) les objets de taille inférieure au volume élémentaire représentatif (cellule) ne sont pas explicitement modélisés et ii) les équations utilisées ne permettent pas de rendre compte des régimes d'écoulement karstiques. Cette approche a cependant été menée avec succès sur plusieurs systèmes présentant des structures karstiques (Abusaada and Sauter, 2013; Larocque et al., 1999; Scanlon et al., 2003; Wang et al., 2016) et montre la capacité d'un modèle de ce type à simuler les écoulements d'un aquifère karstifié. Cette approche ne permettra cependant pas de rendre compte des temps de transfert rapides observés sur le terrain, tel que les essais de traçages (Chapitre 4).

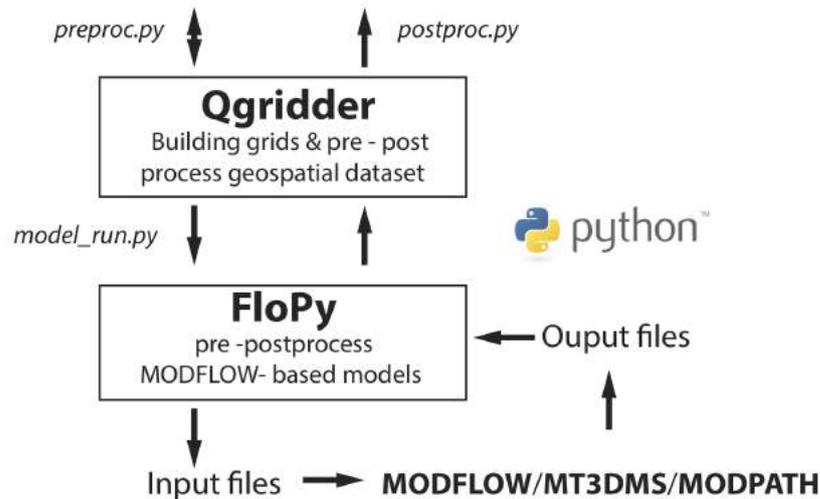
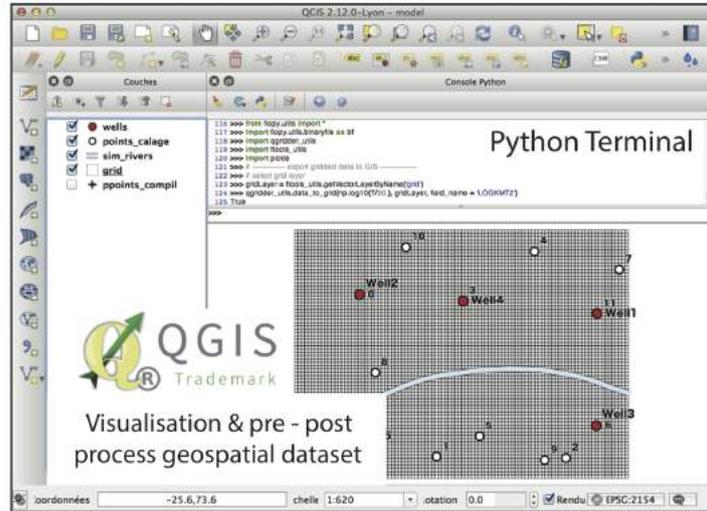
### 5.3 Plateforme de modélisation

Les codes de calculs utilisés pour la modélisation sont MODFLOW (McDonald and Harbaugh, 1988) pour l'écoulement, MT3DMS (Zheng and Wang, 1999) pour le transport advectif-dispersif et MODPATH (Pollock, 1994) pour le suivi de particules. Ces deux codes de calculs, basés sur les écoulements obtenus avec MODFLOW sont largement utilisés au sein de la communauté de modélisateur et présentent l'avantage d'être libres, gratuits et très bien documentés. Ce qui offre une flexibilité appréciable pour gérer de nombreuses exécutions de modèles en parallèle pour l'estimation des paramètres, la gestion d'incertitude et les tests de scénarios.

Le logiciel de Système d'Information Géographique (SIG) Qgis ([www.qgis.org](http://www.qgis.org)) est ici utilisé pour la visualisation et le pré-traitement des données géographiques d'entrées des modèles. Le maillage est réalisé à l'aide du *plugin* Qgridder (<https://github.com/apryet/Qgridder>) (Pryet et al., 2015a). Les fichiers d'entrées / sorties des modèles sont générés et lus en langage Python avec l'enveloppe (*wrapper*) FloPy (<https://github.com/modflowpy/flopy>) (Bakker et al., 2016) (voir Figure 5.1).

### 5.4 Modélisation de l'écoulement

Les écoulements sont modélisés avec le code de calcul MODFLOW-2005 (Harbaugh, 2005; McDonald and Harbaugh, 1988), code d'écoulement développé par l'USGS (*United States Geological Survey*) qui résout l'équation de la diffusivité à travers la technique numérique des différences finies. Bien que les écoulements réels sont en 3D, l'utilisation d'un modèle 2D horizontal permet de réduire considérablement les temps de calcul ce qui est nécessaire à l'estimation des paramètres, la gestion des incertitudes et l'évaluation de multiples scénarios de gestion. Les modèles 2D horizontaux font l'approximation de Dupuit-Forchheimer



**Figure 5.1** : Schéma conceptuel de la plateforme de modélisation utilisée : l'interface graphique du SIG Qgis est d'abord utilisée pour visualiser et pré-traiter les données géographiques d'entrée. Le *plugin* Qgis QgriDder est alors employé pour générer le maillage. Les scripts Python `preproc.py` et `model_run.py` sont ensuite exécutés pour terminer le traitement des données d'entrée et communiquer avec le *wrapper* FloPy pour l'exécution d'un ou plusieurs modèles. Les résultats du modèle sont renvoyés vers Qgis pour la visualisation et le traitement, par l'intermédiaire de FloPy et du script Python `postproc.py`

(D-F), supposant que les flux sont majoritairement horizontaux et donc que les gradients verticaux sont négligeables. La comparaison des solutions utilisant l'approximation de D-F avec les solutions des flux tri-dimensionnel (3D) montrent que les charges calculées avec un modèle D-F sont quasiment indistinguables des charges du modèle 3D à une distance supérieure à  $2.5 \times d$  d'un objet hydraulique à l'origine de flux verticaux (rivière, puits partiellement pénétrants ...) (Haitjema, 2006), où :

$$d = b\sqrt{K_h/K_v} \quad (5.1)$$

Avec,  $b$  [L] l'épaisseur de l'aquifère, et  $K_h/K_v$  l'anisotropie de conductivité hydraulique de l'aquifère. Dans le cas d'un écoulement souterrain à l'échelle régionale ou intermédiaire, où les objets hydrauliques à l'origine des flux verticaux sont localisés aux conditions limites, l'approximation de D-F est bonne si la longueur du système est supérieure à  $5d$  (Haitjema, 2016). Dans notre cas, cette longueur est comprise entre 50 m et 140 m (avec  $b = 30$  m et  $0.1 < K_h/K_v < 0.8$ ), ce qui est largement inférieur aux dimensions du système ( $> 1$  km). Cela nous permet d'utiliser l'approximation de D-F.

Les variations de charge dans l'aquifère sont inférieures à 10% de l'épaisseur de l'aquifère (environ 40m) ce qui permet de faire l'hypothèse d'une transmissivité constante dans le temps. Cela permet de linéariser l'équation de la diffusivité. Ainsi pour des flux 2D horizontaux dans un aquifère libre, hétérogène et isotrope, l'équation de la diffusivité est définie par (de Marsily, 1986) :

$$\omega_s \frac{\partial h}{\partial t} + Q(x, y) = \frac{\partial}{\partial x} \left( T(x, y) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( T(x, y) \frac{\partial h}{\partial y} \right) \quad (5.2)$$

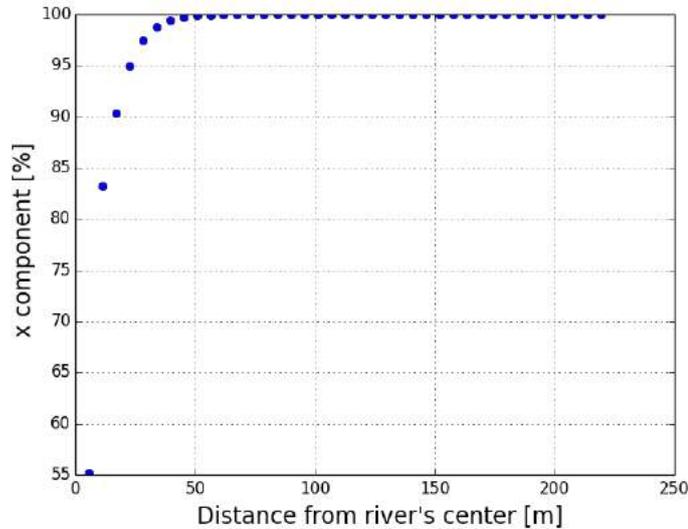
Où,  $\omega_s$  [-] est la porosité de drainage,  $h$  [L] la charge hydraulique,  $T(x, y)$  [ $L^2 T^{-1}$ ] le champ de transmissivité de l'aquifère et  $Q(x, y)$  [ $L T^{-1}$ ] le terme source. L'approximation d'une transmissivité constante dans le temps permet de linéariser l'équation de la diffusivité et d'éviter les calculs itératifs trop longs. Une telle approximation permet ainsi de réduire le temps d'exécution et d'augmenter la stabilité du modèle, ce qui est particulièrement utile pour l'exécution de multiples modèles (calibration, analyse d'incertitudes, *etc*) (Sheets et al., 2015). La modélisation nécessite la discrétisation du domaine spatial et temporel ainsi que l'imposition de conditions aux limites externes et internes. Les paramètres hydrodynamiques de l'aquifère sont également à renseigner.

## 5.4.1 Discrétisation

### 5.4.1.1 Discrétisation spatiale

L'emprise du modèle consiste en un rectangle (2D) de 4490 m par 2600 m, elle est volontairement étendue afin de limiter l'influence des conditions limites sur la zone d'intérêt.

Le choix de la grille de modélisation est une étape importante, qui conditionne la précision de la solution, le temps de calcul (Anderson et al., 2015), et peut aussi avoir une influence sur la modélisation des échanges entre les eaux de surface et les



**Figure 5.2 :** Part horizontale de l'écoulement, tous les 5 m depuis le centre de la rivière, calculée avec l'application développée chapitre 3. Dans le cas présent, on peut considérer que les écoulements sont strictement horizontaux au delà de 50 m de la rivière

eaux souterraines (Haitjema et al., 2001; Hunt et al., 2003; Mehl and Hill, 2010). En effet, comme discuté dans le chapitre 3 et expliqué par Mehl and Hill (2010), la discrétisation spatiale choisie va directement influencer les volumes nappe-rivière échangés, si la valeur de conductance de la condition de Cauchy n'est pas adaptée au maillage. Afin de conserver un sens physique à la condition limite rivière, la taille des cellules rivière doit contenir l'ensemble des flux convergents / divergents associé aux échanges nappe-rivière. Ainsi la distance, depuis la rivière, à partir de laquelle les flux sont horizontaux  $X_{far}$  (condition de Dupuit-Forchheimer) doit être calculée afin d'appliquer un maillage en conséquence. Plusieurs auteurs (Haitjema et al., 2001; Morel-Seytoux, 2009; Rushton, 2007) utilisent des solutions empiriques pour déterminer cette distance. Le modèle numérique développé dans le chapitre 3 nous permet de calculer  $X_{far}$ . Le gradient nappe-rivière maximal observé sur le terrain, ainsi que les paramètres géométrique et hydrodynamique a priori sont utilisés pour estimer la composante verticale des flux en fonction de la distance à la rivière (Figure 5.2).

La rivière étant placée au centre de la cellule, la taille des cellules rivière doit théoriquement être au minimum de  $2 \times X_{far}$ , ce qui fait ici 100 m. Le respect de cette distance permet d'assurer un sens physique à la condition limite rivière de type Cauchy. Cependant une distance de cellule inférieure n'implique pas automatiquement une simulation erronée des échanges nappe-rivière, un calcul d'une valeur de conductance adaptée doit alors être étudié. Étant donné l'étendue spatialement restreinte des phénomènes à représenter, et la proximité des objets à modéliser (les ouvrages de production sont à moins de 100m de la rivière) de telles tailles de cellule sont ici inadaptées. Un choix entre le niveau de détail des

solutions apportées par le modèle et le sens physique de la condition limite rivière doit être fait. En l'occurrence, il n'est pas souhaitable de rogner sur la précision des solutions du modèle dans le but de conserver un sens physique strict des paramètres. Ainsi, une discrétisation spatiale plus appropriée aux phénomènes à modéliser, de 10 m × 10 m a été choisie. Un calcul de conductance adapté à ce maillage devra donc être appliqué. Par conséquent, le paramètre de la condition limite rivière ainsi que les paramètres hydrodynamiques à proximité de la rivière perdent leur sens physique. On introduit une erreur structurelle dans le modèle à travers l'hypothèse de flux horizontaux dans des mailles où ils ne le sont pas en réalité. Par conséquent, la conductivité hydraulique sur la zone 0 -100 m depuis la rivière peut-être réduite pendant la calibration en deçà de sa valeur réelle pour compenser l'erreur structurelle.

Avec une discrétisation spatiale de 10 m × 10, le nombre total de cellules est de 117 448.

#### 5.4.1.2 Discrétisation temporelle

Permanent ou transitoire ? Cette question est fondamentale et chacun des deux type de simulation présente ses avantages et limitations. Les systèmes hydrogéologiques ne sont quasiment jamais à l'état permanent (Rousseau-Gueutin et al., 2013), cependant plusieurs problèmes peuvent être résolus par la modélisation en régime permanent (Anderson et al., 2015). Townley (1995) (dans Haitjema (2006)) a étudié analytiquement de multiples problèmes d'écoulement sous condition de forçages périodiques (marée, interaction nappe-rivière, variation annuelle de recharge). Il détermine que ces solutions analytiques sont contrôlées par un paramètre sans dimension :

$$\tau = \frac{S \times L^2}{4 \times k \times b \times P} \quad (5.3)$$

Où  $S$  [-] est le coefficient d'emménagement,  $L$  [m] la distance moyenne aux eaux de surfaces,  $k$  [m s<sup>-1</sup>] la conductivité hydraulique,  $b$  [m] l'épaisseur moyenne d'aquifère saturée et  $P$  [s] la période de forçage (365 j pour les fluctuations saisonnières). Le paramètre  $\tau$  permet de caractériser le temps réponse de l'aquifère à un forçage périodique. La valeur de  $\tau$  peut alors être un indicateur du régime transitoire ou permanent de simulation à adopter (Haitjema, 2006, 1995) :

- $\tau > 1$  : un modèle en régime permanent est valable ;
- $0.1 < \tau < 1$  : un modèle transitoire est nécessaire ;
- $\tau < 0.1$  : une succession d'états permanents (hautes/basses eaux, année humide/sèche) peut être adopté ;

Dans notre cas :

$$\frac{0.3 \times 50^2}{4 \times 1 \times 10^{-1} \times 30 \times 864000} < \tau < \frac{0.01 \times 50^2}{4 \times 1 \times 10^{-6} \times 30 \times 864000} \quad (5.4)$$

ainsi :

$$7 \times 10^{-4} < \tau < 7 \quad (5.5)$$

Cette écart extrême est expliqué par la nature, fortement hétérogène, des paramètres hydrodynamiques du système. La période de forçage choisie est de 864000 sec (10 jours) afin de rendre compte de la périodicité des forçages naturels (rivière) et anthropiques (pompage). Ces résultats indiquent qu'une simulation en régime permanent peut être pertinente. Le choix de simuler le système en régime permanent peut alors être judicieux, réduisant le temps de calcul et permettant ainsi de réaliser plusieurs scénarios prospectifs. Cependant, le nombre important d'informations transitoires dont nous disposons sur le système (charge, recharge, niveau en rivière, débit d'exploitation des ouvrages) nous permet d'apporter de l'information supplémentaire à l'étape de calibration et ainsi de mieux la contraindre. En effet, l'ajout de données d'observations transitoires permet de réduire le caractère mal-posé (*ill-posed*; non-unicité de la solution) des modèles hydrogéologiques (Hill and Tiedeman, 2006; Hunt et al., 2006; Zhou et al., 2014). Au vue des fluctuations journalières de niveau d'eau en rivière, des débits de pompage et des événements de recharge. La calibration du modèle sera exécutée en régime transitoire, à partir d'un état permanent simulé comme état initial. Le pas de temps est journalier et constant sur chaque période de simulation, de façon à simuler correctement la dynamique du système sans prolonger les temps de calcul. Il est exécuté sur une période d'une année (Janvier 2014 à Janvier 2016) pour la calibration, et 6 mois (Janvier 2016 à Juillet 2016) pour la validation. La période de simulation choisie pour la calibration du modèle correspond à la période où la densité spatiale du réseau d'enregistrement des niveaux en nappe était maximale.

Au vue de la réactivité supposée du système ( $\tau > 1$ ), et suite à l'étape de calibration, les scénarios prospectifs pourront éventuellement être exécutés en régime permanent afin de réduire les temps de calculs.

## 5.4.2 Conditions limites

### 5.4.2.1 Externes

Les études préalables sur le fonctionnement hydrogéologique du site (Chapitre 4) font état d'écoulement de nappe de sens nord-sud, de sens sud-nord en rive droite et nord-sud en rive gauche de la Jalle. Les écoulements sont fortement contrôlés par les prélèvements et les connexions nappe-rivière.

Idéalement les conditions limites externes d'un modèle sont placées sur des conditions limites naturelles, tel qu'un cours d'eau, un changement d'unité géologique, une zone imperméable *etc.* Dans notre cas l'aquifère Oligocène est d'étendue régionale et dépasse largement l'emprise de la zone d'intérêt, aucun cours d'eau suffisamment proche (et totalement pénétrant) ne permet d'y établir une limite. Les points d'observation en nappe (ADES) sont trop éloignés de la zone d'intérêt pour s'en servir comme limite du modèle (Figure 5.3).



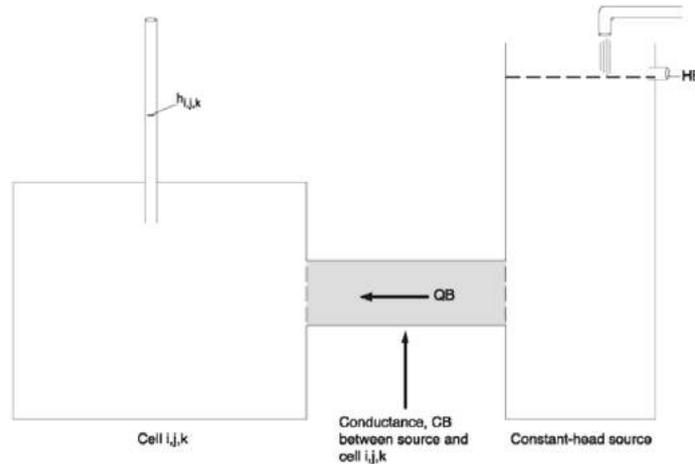
**Figure 5.3 :** Puits instrumentés ADES et zone d'étendu du modèle

Les limites sont alors placées "arbitrairement" relativement éloignées de la zone d'intérêt, ce qui a l'avantage d'en limiter leur influence par rapport aux conditions limites internes (Anderson et al., 2015). Les limites externes sont placées suffisamment loin de sorte que l'effet des contraintes internes du système n'atteignent pas ces dernières. Les flux étant, à l'échelle du site, majoritairement sur un axe nord-sud (Cabaret, 2011), des conditions à flux nul (type Neumann) sont appliqués aux conditions limites est et ouest du modèle. Dans un soucis de contraindre au minimum l'influence des conditions limites nord et sud du modèle, comme pourrait le faire une condition à potentiel imposé (type Dirichlet), une condition de type limite dépendante de la charge (General Head Boundary, type Cauchy) est appliquée aux limites nord et sud et s'exprime ainsi Figure 5.4 :

$$QB = CB \times (HB - h_{i,j,k}) \quad (5.6)$$

Où  $QB [L^3 T^{-1}]$  est le flux échangé entre la cellule à laquelle la condition est appliquée et la cellule adjacente,  $CB [L^2 T^{-1}]$  est la conductance,  $HB [L]$  est la charge de la cellule adjacente et  $h_{i,j,k} [L]$  est la charge de la cellule à laquelle la condition est appliquée.

Une condition à potentiel imposé (type Dirichlet) fixe une charge et contraint ainsi la direction des écoulements (perpendiculaires à la condition limite) et leur intensité, pouvant provoquer une forte erreur structurelle. Avec une condition de type Cauchy (GHB), les valeurs de charge à la frontière ne sont pas nécessairement celles de la condition GHB ( $H_{i,j,k}$ ). Une condition GHB revient à imposer un gradient hydraulique. Ce type de condition peut alors permettre de réduire l'erreur structurelle en jouant directement sur les flux entrant dans le modèle via une valeur de conductance, de plus elle ne force pas de direction d'écoulement.



**Figure 5.4 :** Fonctionnement de la condition limite de type GHB d'après McDonald and Harbaugh (1988)

Il reste à définir la charge et la conductance à appliquer aux conditions GHB nord et sud. Fleckenstein et al. (2006) calculent la charge à partir de la moyenne arithmétique des charges sur 15 ans à 1000 m des frontières du modèle, simulée avec un modèle régional. Hassan et al. (2014) définissent la charge générale à partir de mesures piézométriques dans l'aquifère et la conductance est ajustée par calibration. Les valeurs de charge simulées pour l'aquifère Oligocène avec le modèle régional développé par Cabaret (2011) en Gironde, et les observations de terrain, permettent d'évaluer un niveau piézométrique compris entre 10 et 15 m pour la condition nord et 8 à 12 m pour la condition sud. Des valeurs moyennes de 12 m et 10 m sont appliquées respectivement à la condition nord et sud. Les valeurs initiales de conductance ( $CB$ ) sont calculées selon la formule suivante (McDonald and Harbaugh, 1988) :

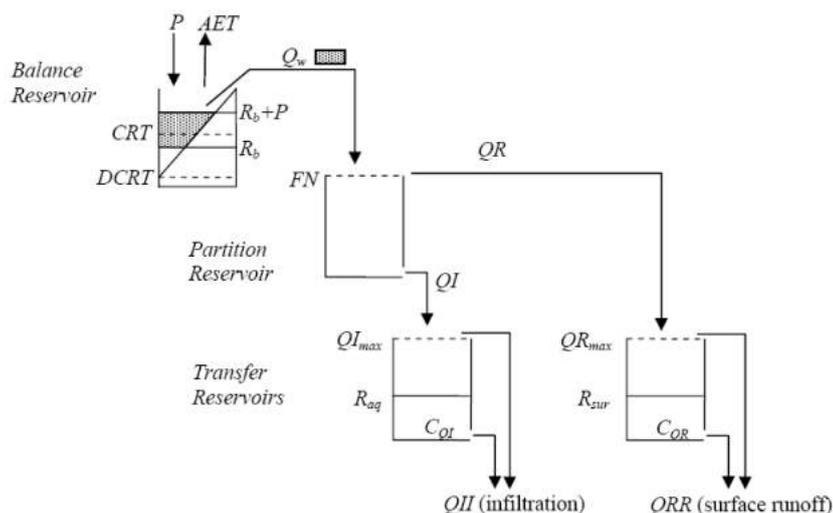
$$CB = \frac{K \times A}{L} \quad (5.7)$$

Où  $K$  [ $L T^{-1}$ ] est la conductivité hydraulique de l'aquifère au droit de la condition limite,  $A$  [ $L^2$ ] est l'aire de la cellule dans un plan vertical parallèle à la bordure du domaine, et  $L$  [ $L$ ] la distance entre  $HB$  et  $h_{i,j,k}$  (Figure 5.4).

#### 5.4.2.2 Ouvrages de prélèvement

Les ouvrages de prélèvement R20 et R21, la galerie drainante de Gamarde et les Barbacanes (voir Chapitre 4, Figure 4.4 et 4.7) sont modélisés de la manière suivante.

- Les pompages dans les puits de production R20 et R21 sont simulés avec des points sources (*well package* (WEL) de MODFLOW). Une valeur de débit par pas de temps de calcul déduite des chroniques de prélèvements des ouvrages du site est associée à chacun des deux puits.



**Figure 5.5** : Schéma conceptuel de la fonction de production de Ledoux d'après (Ledoux et al., 1984). Avec  $CRT$  la capacité au champ moyenne [mm],  $DCRT$  la capacité au champ minimale [mm],  $FN$  la capacité d'infiltration du sol [mm],  $QI_{max}$  le paramètre d'infiltration maximal [mm],  $QR_{max}$  la saturation maximale du sol [mm],  $C_{QI}$  le coefficient de récession du flux vers la zone non saturée [ $j^{-1}$ ],  $C_{QR}$  le coefficient de récession du flux hypodermique [ $j^{-1}$ ]

- La Galerie drainante de Gamarde, et les Barbacanes sont simulées avec des conditions de type Cauchy (*drain package* (DRN) de MODFLOW). Cette condition est similaire à la condition rivière, à la différence que si la charge de la cellule à laquelle la condition DRN est appliquée est inférieure à la charge dans le drain, alors le débit d'échange est nul. Autrement dit, le sens d'échange s'effectue toujours dans le sens nappe vers drain. Une chronique journalière de charges mesurées en galerie est appliquée à la condition limite de cette dernière. Ne disposant pas de chronique de charge pour les Barbacanes, une valeur moyenne du niveau d'eau de 8.3 m mesuré au GPS différentiel est appliquée. Une conductance de  $1 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  pour la Galerie et de  $7 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  pour les Barbacanes, obtenue avec l'outil développé (voir Chapitre 3), constituent les valeurs initiales de conductance.

### 5.4.2.3 Recharge

L'occupation des sols étant globalement homogène sur la zone d'intérêt du modèle, un flux de recharge homogène est appliqué au pas de temps journalier à l'ensemble du domaine avec le *recharge package* (RCH) de MODFLOW (condition de type Neumann). Les chroniques de recharge sont générées à partir de la fonction de production de Ledoux ((Ledoux et al., 1984), Figure 5.5). Les données météorologiques d'entrées, précipitations et ETP (Penman-Monteith), sont fournies au pas de temps journalier par la station Météo France de l'aéroport Mérignac à environ 10 km de la zone d'étude.

Paramètre	Moyenne	Écart-type
Épaisseur de l'aquifère	30 m	10 m
Largeur de la cellule	10 m	10 m
Largeur de la rivière	10 m	5 m
Profondeur de la rivière	1 m	1 m
Angle des berges	90°	5°
Épaisseur du lit de a rivière	3 m	1 m
Anisotropie	0.6	0.1
Conductivité hydraulique de l'aquifère	$5 \times 10^{-4} \text{m s}^{-1}$	$1 \times 10^{-5} \text{m s}^{-1}$
Conductivité hydraulique du lit de la rivière	$5 \times 10^{-4} \text{m s}^{-1}$	$1 \times 10^{-5} \text{m s}^{-1}$

**Tableau 5.1** : Moyenne et écart-type a priori considérés pour la distribution probabiliste des paramètres du modèle de calcul de *CRIV*

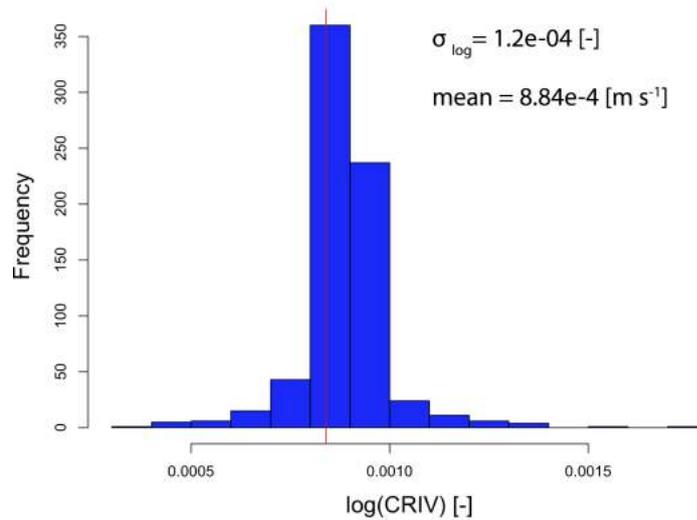
Les paramètres *CRT* et *DCRT* servent à estimer la pluie efficace, disponible au ruissellement et à l'infiltration. Le paramètre *FN* contrôle la partition entre ruissellement et infiltration de la pluie efficace.  $C_{QR}$  et  $QR_{max}$  interviennent dans les dynamiques de ruissellement.  $C_{QI}$  et  $QI_{max}$  interviennent dans les dynamiques d'infiltration.

*DCRT* intervient dans plusieurs fonctions non-linéaires, difficile à calibrer il est alors préférable d'en fixer une valeur (Labarthe, 2016). Une étude bibliographique des valeurs de *DCRT* usuellement utilisées sur des sols similaires (Labarthe, 2016; Pryet et al., 2015b) permet de fixer une valeur à 75 mm. Les valeurs de  $C_{QR}$ ,  $QR_{max}$ ,  $C_{QI}$  et  $QI_{max}$  sont également fixées d'après Labarthe (2016); Pryet et al. (2015b) respectivement à 0.1, 0.1, 0.1, 10. Les valeurs de *CRT* et *FN* seront quand à elles calibrées.

#### 5.4.2.4 Rivière

Les deux cours d'eau présents sur la zone d'étude, la rivière Jalle et le ruisseau St Christine sont modélisés au travers du *river package* (RIV) de MODFLOW (condition limite de type Cauchy). L'outil développé dans le chapitre 3 sert à déterminer une valeur initiale de *CRIV*. Comme décrit dans la section 5.4.1.1 pour le maillage établi, le *CRIV* perd le sens physique que lui confère la méthode proposée pour le calculer. Néanmoins, un *CRIV* s'adaptant aux contraintes de discrétisation est choisi pour simuler correctement les flux nappe-rivière échangés. Pour cela une distribution probabiliste de *CRIV* est obtenue par un tirage aléatoire à partir de distribution statistique des paramètres d'entrées (Tableau 6.1).

*CRIV* est calculé pour chacun des 700 tirages de jeu de paramètres. Nous supposons une distribution normale pour les paramètres géométriques et log-normale pour les paramètres hydrodynamiques. Les résultats sont présentés Figure 5.6. La



**Figure 5.6 :** Distribution probabiliste de *CRIV*

distribution des largeurs de cellules permet de prendre en compte l'incertitude sur *CRIV* liée à la taille de la cellule (10 m). En prenant une telle gamme de largeur de cellule, cela permet de prendre en compte l'incertitude faite sur le calcul de la charge de la cellule rivière.

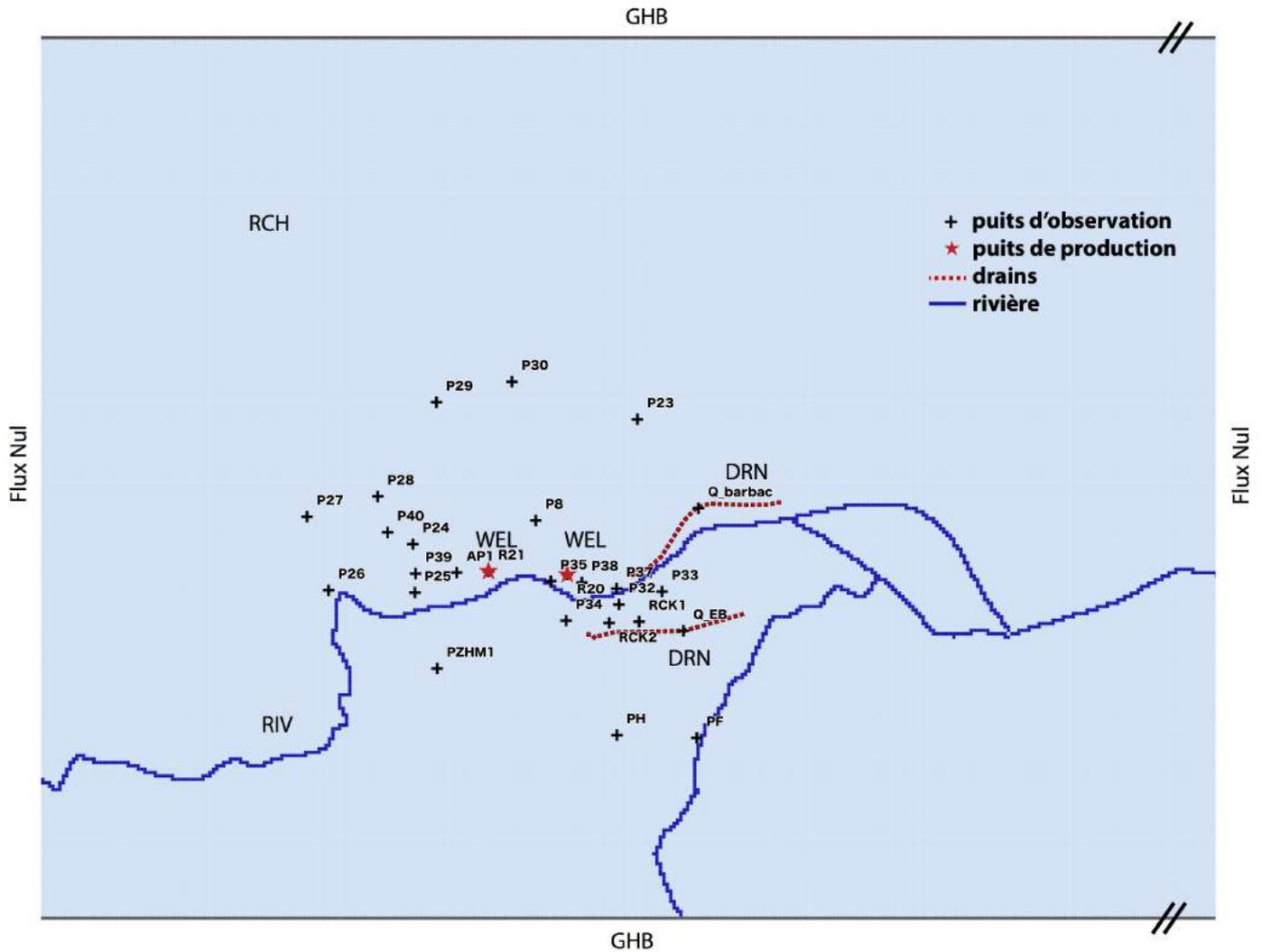
La charge appliquée aux cellules rivière est déduite des chroniques de pression enregistrées sur le terrain, puis étendue par interpolation linéaire à l'ensemble des cellules rivière afin de respecter une pente moyenne de 3 ‰ mesurée sur le terrain.

### 5.4.3 Propriétés hydrodynamiques

Les valeurs initiales des propriétés hydrodynamiques sont établies à partir des travaux de terrain (Chapitre 4) et la littérature (Canik, 1968; Larroque, 2004). Pour la transmissivité et la porosité de drainage, elles sont respectivement estimées à  $1.5 \times 10^{-2} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  et 0.2 [-]. La valeur de transmissivité correspond à la valeur moyenne des conductivités hydrauliques estimées par essai de nappe ( $5 \times 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$ ) multipliée par l'épaisseur de l'aquifère (30m), supposée constante à l'échelle du modèle. La valeur de coefficient d'emmagasinement, provient d'une estimation à partir d'études du même système aquifère (Cabaret, 2011; Canik, 1968; Larroque, 2004). L'hétérogénéité du champ de ces deux paramètres sera représentée aux travers d'un ensemble de point-pilotes (de Marsily et al., 1984; Doherty, 2003), dont les valeurs seront ajustées par calibration.

### 5.4.4 Synthèse

L'ensemble des conditions limites du modèle d'écoulement est synthétisé Figure 5.7 :



**Figure 5.7** : Synthèse des conditions limites du modèle d'écoulement. A noter que par soucis de visibilité l'emprise du modèle dans sa partie est a été légèrement raccourcie.

## 5.5 Modélisation du transport

Le transport est simulé avec le code de calcul MT3DMS développé par Zheng and Wang (1999) d'après (Zheng, 1990). MT3DMS permet de simuler les variations de concentration d'espèces dissoutes en considérant l'advection, la dispersion, la diffusion moléculaire et quelques réactions chimiques simples (Zheng et al., 2012). MT3DMS communique directement avec MODFLOW, qui lui fournit les solutions d'écoulement nécessaires à la simulation du transport par résolution de l'équation d'advection-dispersion. En deux dimensions elle est définie par :

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j}) - \theta \nu_i \frac{\partial C}{\partial x_i} + q_s C_s + \Sigma R_n \quad (5.8)$$

Où  $C$  [ $\text{ML}^{-3}$ ] est la concentration de l'espèce,  $\theta$  [-] est la porosité de l'aquifère,  $t$  [T] est le temps,  $x_i$  [L] est la distances le long de l'axe,  $D_{ij}$  [ $\text{L}^2 \text{T}^{-1}$ ] est le tenseur de dispersion hydrodynamique,  $\nu$  [ $\text{L T}^{-1}$ ] est la vitesse de pore,  $q_s$  [ $\text{T}^{-1}$ ] est le débit du terme source,  $C_s$  [ $\text{ML}^{-3}$ ] est la concentration de l'espèce du terme source,  $\Sigma R_n$  [ $\text{ML}^3 \text{T}^{-1}$ ] est le terme de réaction chimique, il n'est pas pris en compte ici. Le tenseur de dispersion hydrodynamique, pour un milieu poreux isotrope est définie, d'après Bear (2013), par :

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{\nu_x^2}{|\nu|} + \alpha_T \frac{\nu_y^2}{|\nu|} + D^* \quad (5.9)$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{\nu_y^2}{|\nu|} + \alpha_T \frac{\nu_x^2}{|\nu|} + D^* \quad (5.10)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{\nu_x \nu_y}{|\nu|} \quad (5.11)$$

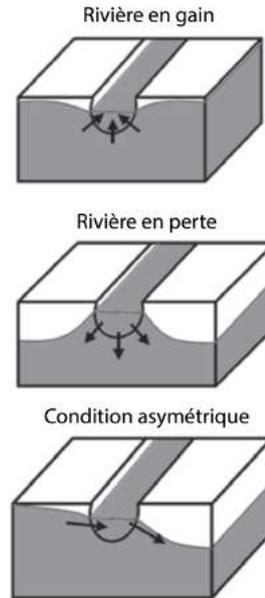
où  $D_{xx}$ ,  $D_{yy}$  [ $\text{L}^2 \text{T}^{-1}$ ] sont les composantes principales du tenseur de dispersion,  $D_{xy}$ ,  $D_{yx}$  [ $\text{L}^2 \text{T}^{-1}$ ] sont les termes diagonaux du tenseur de dispersion,  $\alpha_L$  [L] est la dispersivité longitudinale,  $\alpha_T$  [L] est la dispersivité transversale,  $D^*$  [ $\text{L}^2 \text{T}^{-1}$ ] est la diffusion moléculaire effective,  $\nu_x$ ,  $\nu_y$  [ $\text{L T}^{-1}$ ] sont les composantes de vitesse de pore le long de l'axe  $x$  et  $y$ ,  $|\nu| = \sqrt{\nu_x^2 + \nu_y^2}$  [ $\text{L T}^{-1}$ ] est la magnitude du vecteur vitesse.

MT3DMS se base sur la même discrétisation spatiale que MODFLOW, cependant la discrétisation temporelle ainsi que les conditions limites et les paramètres de transport ont besoin d'être renseignés.

### 5.5.1 Discrétisation

#### 5.5.1.1 Discrétisation spatiale

Bien que MT3DMS doit suivre la même discrétisation spatiale que MODFLOW, le maillage doit souvent être adapté en fonction des besoins du transport également (Zheng and Wang, 1999). Prenons l'exemple d'un modèle d'interaction



**Figure 5.8 :** Configuration asymétrique des échanges nappe-rivière par rapport au régime en gain et en perte de la rivière, modifié d'après Ben Simon et al. (2015)

nappe-rivière. Lorsque la rivière est représentée par une condition de type Cauchy sur une seule cellule "rivière", seules les configurations perte ou gain peuvent être représentées. Les configurations asymétriques ne peuvent alors être représentées (Figure 5.8).

Cela n'a pas d'importance pour la simulation des écoulements puisque le bilan hydrique de la cellule reste globalement correct. Cependant, cet aspect devient gênant pour la simulation du transport. En effet, dans une configuration asymétrique où la majorité de la rivière gagne de l'eau, mais qu'une minorité en perd, aucun transport de soluté n'aura lieu depuis la rivière vers l'aquifère. À la suite de la simulation de transport nappe-rivière exploratoire, Ben Simon et al. (2015) arrivent à la conclusion qu'un minimum de 2 cellules est nécessaire pour simuler correctement le transport nappe-rivière dans des conditions asymétriques. Le niveau de discrétisation est conditionné par le gradient hydraulique de l'aquifère ainsi que le ratio entre la conductivité hydraulique de l'aquifère et celle du lit de la rivière. Ben Simon et al. (2015) rappellent tout de même que ce type de configuration d'échange nappe-rivière reste marginal, et que les limitations engendrées restent minimales dans la majorité des cas.

Dans un but de représenter au mieux les échanges nappe-rivière, cela implique donc de raffiner les cellules rivière du modèle d'écoulement et de transport. Une discrétisation spatiale de  $2.5 \times 2.5$  pour les cellules rivière est alors choisie. MODFLOW-2005 ne permettant pas de maille déstructurée, le raffinement des cellules rivière se propage le long des deux axes (x,y) portant le nombre total de cellules à 972 000. La valeur de conductance,  $CRIV$ , de la condition limite rivière précédemment déterminée est divisée par 4 afin de respecter cette nouvelle discrétisation spatiale.

### 5.5.1.2 Discrétisation temporelle

Généralement, le modèle d'écoulement et de transport ont les mêmes pas de temps. Cependant, lorsque l'écoulement est permanent, alors le transport peut avoir un nombre de pas de temps différents de l'écoulement, nécessaire pour atteindre un état permanent de transport (Zheng and Wang, 1999). La durée des pas de temps utilisés pour l'écoulement est généralement trop longue pour être utilisée aussi pour le transport, du fait de contraintes de stabilité et/ou de précisions plus restrictives pour le transport que pour l'écoulement. Chaque pas de temps de l'écoulement doit alors être divisé en pas de transport. La taille des pas de transport est soit spécifiée soit déterminée automatiquement par le modèle.

Contrairement aux observations de charges, nous ne disposons de rares valeurs concentrations mesurées (en réalité, rapport de mélange nappe-rivière) sur la zone étudiée. La simulation du transport transitoire à partir d'un état transitoire d'écoulement perd alors de son intérêt pour la calibration. On s'intéressera donc, pour le modèle de transport au comportement permanent. Néanmoins, la résolution numérique de l'équation 5.5 pose souvent problème en régime permanent. On réalisera donc un calcul transitoire de l'équation 5.5, mais avec des conditions de forçage permanentes, jusqu'à ce que le système se stabilise.

### 5.5.2 Conditions limites

Le but du modèle de transport est de modéliser les transferts de masse nappe-rivière, à travers la simulation des rapports de mélanges surface / souterrain à l'échelle du site. Pour cela, seule la condition limite (type Cauchy) représentant la rivière Jalle sera affectée d'une concentration constante dans l'espace et dans le temps d'une valeur de 1, l'ensemble du domaine sera constitué de cellules de calcul avec une concentration initiale de 0, les autres conditions limites auront comme valeur 0.

## 5.6 Discussion et perspectives

La construction du modèle précède sa phase de calibration, où la résolution du problème inverse consiste à contraindre les valeurs des paramètres à partir des observations. Cette étape est nécessaire à la réalisation de prédictions fiables par le modèle. Elle peut être manuelle par essai-erreur ou automatisée algorithmiquement. Bien que l'étape manuelle par essai-erreur soit fondamentale, car elle permet de comprendre comment chacun des paramètres affecte les sorties du modèle, elle contient certaines limitations. En effet cette méthode est considérée comme laborieuse, trop demandeuse de temps, et subjective (Carrera and Neuman, 1986). Généralement une méthode de calibration automatique, mathématiquement rigoureuse doit être adoptée en complément. Les méthodes algorithmiques de calibration nécessitent de multiples exécutions de modèle en fonction du nombre de paramètres. Dans le cas des modèles hautement paramétrisés (contenant beaucoup de paramètres), le temps de calibration peut s'avérer long selon la

rapidité d'exécution du modèle. Malgré le fait que les puissances de calculs aient augmentées aux cours de la dernière décennie, les temps de calibration peuvent vite devenir trop importants pour être réalisables. Ce problème est souvent le cas pour la calibration des modèles de transport, ou la simulation du transport par advection-dispersion sur une période annuelle peut vite demander des heures voire des jours pour être exécutée sur un ordinateur personnel (Hill and Tiedeman, 2006; Konikow, 2011). En effet des tests préliminaires sur le modèle de transport envisagé montrent des temps de calcul allant de 30 min et 3 h par année simulée, selon le *solver* utilisé. Atteindre un état de transport à l'équilibre nécessite alors plusieurs heures de calculs. De tels temps d'exécution, empêchent toute calibration algorithmique. Si l'on suppose 10 000 appels de modèle par calibrations, nécessitant chacun 1 h de calculs, une calibration demande alors plus d'une année pour être exécutée. Ce temps peut être réduit en parallélisant les calculs, mais reste cependant toujours trop important.

La simulation des transferts de masse entre la rivière et la nappe fait partie des objectifs à atteindre par le modèle. Dans un but d'améliorer la calibration et les performances du modèle, l'ajout d'information sur le transport, tels que les rapports de mélange observés sur le terrain, est un réel avantage. Le modèle de transport élaboré au cours de ce chapitre ne permettant pas de réaliser cette étape de part sa durée d'exécution, un modèle de substitution (*surrogate model* (Burrows and Doherty, 2015)) a été développé à partir du code de suivi de particules MODPATH (Pollock, 1994). Ce modèle permet de simuler rapidement les rapports de mélange entre les eaux de surface et les eaux souterraines, à partir du modèle d'écoulement décrit section 5.4 et du modèle équivalent développé. Par la suite le modèle de transport présenté (section 5.5), avec le maillage fin adapté, sera utilisé pour valider les résultats de la modélisation inverse, et comme modèle direct. Cette approche est présentée dans le chapitre suivant sous forme d'un article qui vise à être soumis dans une revue scientifique.



## Chapitre 6

# Parameter Estimation with Particle Tracking as a Surrogate Model for Advective-Dispersive Transport

# Parameter Estimation with Particle Tracking as a Surrogate Model for Advective-Dispersive Transport

by Yohann Cousquer<sup>1,2</sup>, Alexandre Pryet<sup>1</sup>, Olivier Atteia<sup>1</sup>, Alain Dupuy<sup>1</sup>

---

## Abstract

The inverse problem of groundwater models is often ill-posed and model parameters are likely to be poorly constrained. The issue is less salient when diverse data types are involved in the calibration, such as head and concentration data. However, the use of detailed groundwater models that simulate complex processes can be restrained by prohibitive computation times. For example, advective-dispersive models such as MT3DMS, are generally associated with too large computation times for transport observations in the calibration process. In the case of surface water - groundwater (SW-GW) models, transport observations such as SW-GW mixing ratio would be a relevant field observation to constrain SW-GW exchanges. However SW-GW mixing ratio simulation conventionally needs an advective-dispersive model. Surrogate models have been used to overcome the issue of time computation with the utilization of a lower-fidelity physically surrogate model for the original complex model. This paper proposes a solution, to simulate the SW-GW mixing ratio with the particle-tracking code MODPATH to simulate the SW-GW mixing ratio at a sink point (well or drain). A comparison between surrogate and complex advective-dispersive models shows that dispersion can be neglected when the mixing ratio is simulated in a sink in steady-state condition. The efficiency of the surrogate model to resolve inverse SW-GW transport problems as well as the complex advective-dispersive model is demonstrated through a synthetic case.

---

<sup>1</sup> EA 4592 Georessources & Environment, Bordeaux INP and Univ. Bordeaux Montaigne, EN-SEGID, 1 allée F.Daguin, 33607 Pessac cedex, France

<sup>2</sup> Le LyRE, SUEZ Environnement, Domaine du Haut-Carré 43, rue Pierre Noailles, 33400 Talence, France

## 6.1 Introduction

Parameters involved in groundwater models are generally obtained by history-matching against hydraulic head measurements. However, this approach generally leads to ill-posed inverse problems (Anderman and Hill, 1997; Carrera et al., 2005). This is particularly the case for groundwater - surface water (GW-SW) models, where independent estimates of surface water in/outflow are most important for constraining surface water exchanges (Fleckenstein et al., 2010; Hunt et al., 2006; Sophocleous, 2002). To address this problem, the introduction of additional field observations is an option to alleviate the ill-posedness (Zhou et al., 2014).

In groundwater models, solute transport observations have been used as additional field observations and are included in the calibration process (Christiansen et al., 1995; Hunt et al., 2006; Medina and Carrera, 1996; Pool et al., 2015). According to Konikow (2011) different approaches yield to simulate solute-transport depending on conceptual complexity i) flow equation, solved by MODFLOW (McDonald and Harbaugh, 1988) can provide heads, flux and flow directions, ii) advective transport, as used in MODPATH (Pollock, 1994) can provide velocity vectors and the time of travel iii) advective-dispersive, as used in MT3DMS (Zheng and Wang, 1999) can provide concentration distribution. Theoretically, flow and advective transport models cannot predict concentrations (Konikow, 2011). Consequently, calibration against transport observations are generally made with an advective-dispersion model (Christiansen et al., 1995; Fienen et al., 2009a; Tonkin and Doherty, 2009). The main difficulty of the calibration against concentration observation is the computational burden of advective-dispersive transport simulations. The simulation of advective-dispersive transport over a period of years to decades may require hours or days on modern personal computers (Hill and Tiedeman, 2006; Konikow, 2011). Consequently, a trade-off is often needed between accuracy and execution time (Hill et al., 2016), a greater accuracy generally requires a prohibitive computation time. Simplifying assumptions are often made regarding the spatial distribution of aquifer parameters, groundwater flow and transport dynamics (Hill and Tiedeman, 2006). Thus, only few transport studies inferred heterogeneity from available data, while numerous studies have been conducted for flow problems only (Carniato et al., 2015).

Over the past decade, surrogate modeling has been used to alleviate the issue regarding the computational efficiency of some hydrogeological problems. Surrogate models are mostly used in an optimization framework, where a lower-fidelity physically surrogate simplifies the original complex model so as to reduce the computational cost (Razavi et al., 2012). However, certain criteria must be met by a surrogate model (Burrows and Doherty, 2015) : i) outputs of the surrogate model have to be reasonably consistent with the original complex model ii) it must compute outputs made by the complex model iii) parameters used by both models must play similar roles. For example, a coarser grid and a less accurate numerical solver leads to a surrogate model (Burrows and Doherty, 2015). As classical advective-dispersive modeling is time consuming the following question applies : can we use a particle tracking approach and neglect dispersion, as a

surrogate model to simulate SW-GW exchange observations to improve SW-GW inverse modeling?

Dispersion can be taken into account with a random walk particle tracking method (Delay et al., 2005; Salamon et al., 2006) but which also requires too much computation time.

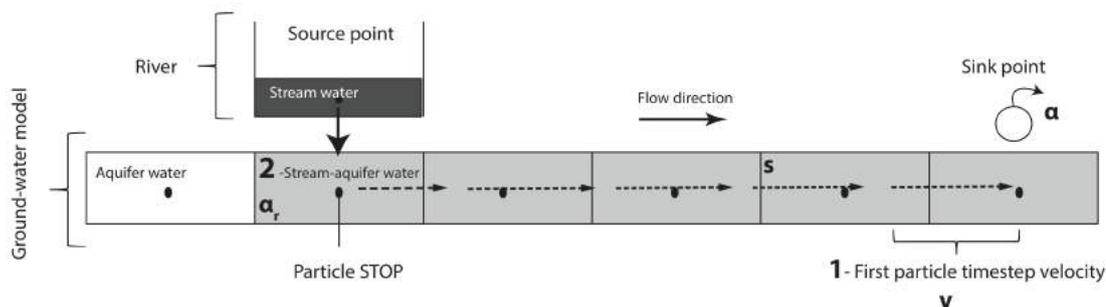
Particle-tracking techniques have been used and compared to advective-dispersive transport models such as MT3DMS. Gusyev et al. (2014) performed a comparison of measured and simulated tritium concentrations with particle-tracking (MODPATH - MODFLOW) and solute transport (MT3DMS - MODFLOW) models. Concentration results are very similar. Particle tracking methods have also been used in surface water - groundwater modeling such as to reproduce temperature observations (Brookfield et al., 2009; Engeler et al., 2011; Kurtz et al., 2014; Mouhri et al., 2013), observed lake plume elevation (Fienen et al., 2009a; Hunt et al., 2006), advective front location observation (Anderman and Hill, 1997; Hill and Tiedeman, 2006) or to delineate the hyporheic zone (Kasahara and Wondzell, 2003; Storey et al., 2003). However, particle tracking has never been used to simulate SW-GW mass transfer and used as additional field observations to improve model calibration.

A method is proposed herein to simulate SW-GW mixing ratio with the particle tracking model MODPATH. The proposed surrogate model is validated by comparing obtained concentrations with the well-established MT3DMS advective-dispersion code on a conceptual case. Thereafter, the surrogate model is used for the resolution of a synthetic surface water - groundwater inverse problem, results are then compared with MT3DMS. Contribution of the proposed surrogate model on surface water - groundwater inverse modeling, benefit and limitation are eventually discussed.

## 6.2 Approach

The approach consists in using advective transport only to simulate SW-GW mixing ratio in a pumping well in steady-state, with particle-tracking. The method is described for a stream simulated with a head-dependent flux (Cauchy-type), boundary condition (Cousquer et al., 2017; Ebel et al., 2009; Flipo et al., 2014; Furman, 2008) as implemented in the MODFLOW river package (McDonald and Harbaugh, 1988). However, it can be used with other boundary conditions (fixed head and fixed flux). The proposed approach consists in automatically determining the origins of particles disseminated around a sink point (well or drain). The quantity of water brought by each particle and its proportion of water from each boundary condition is determined with backward particle tracking. The mixing ratio at the sink point ( $\alpha$ ) is then deduced. The procedure is lead as follows :

A large number of particles ( $>1000$ ) are disseminated around a sink point/zone of a MODFLOW model so as to perform a steady-state MODPATH backward particle tracking simulation. As each particle does not provide the same water



**Figure 6.1 :** for each river particle  $s$  : i) particle is weighted with its first timestep velocity ( $v$ ) ii) the stream water part of the particle is deduced from the cell budget of the river cell. Particles coming from other boundary conditions are simply weighted by their velocity

flow depending on the MODFLOW model velocity field, each particle is weighted with its first tracking velocity ( $v$ ) of the first particle-tracking timestep which corresponds to the arrival of the particle at the sink. Particles are classified depending on their position of origin in order to identify the particles originating from the river ( $s$ ).

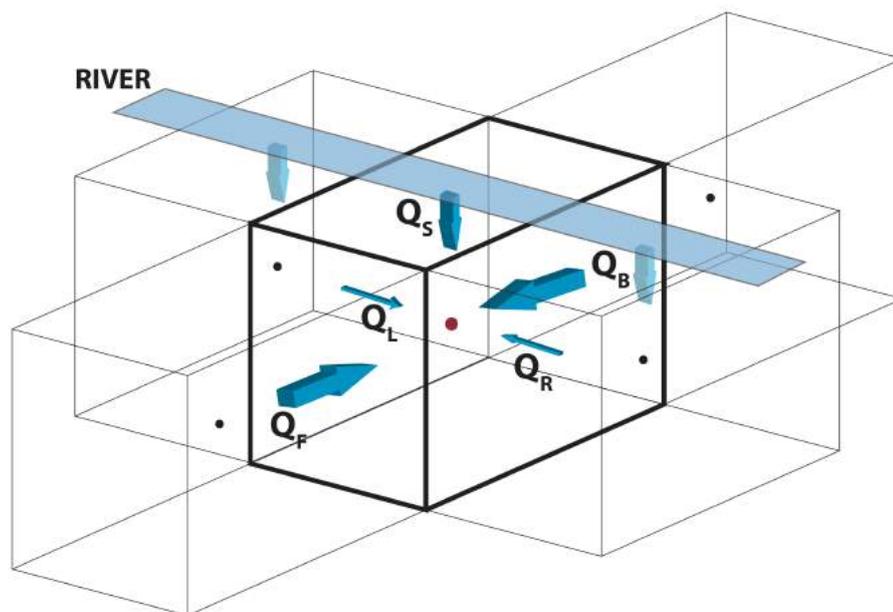
Each particle originating from the river ( $s$ ) is a mix between river and aquifer water when flow through river occurs (see Figure 6.1). So as to determine river part of a  $s$  particle, each  $s$  particle is weighted by the ratio between river water and aquifer water ( $\alpha_r$ ).  $\alpha_r$  is obtained from the cell by cell budget of the MODFLOW model, where in/outflow of each model's cells faces are resumed Figure 6.2 as follow :

$$\alpha_r = \frac{Q_S}{\sum_{i=1} Q_i} \quad (6.1)$$

Where  $Q_S$  is the SW-GW flux and  $\sum_{i=1} Q_i$  are the total cell budget (sum of all  $Q_i$ ).  $Q_L$  and  $Q_R$  are flow component longitudinal to the stream and can be neglected compared to  $Q_F$  and  $Q_B$  in almost all cases. The steps completed for a river particle  $s$  are summarized in Figure 6.1. The total mixing ratio  $\alpha$  of the sink point / drain is the sum of each particle velocity ( $v_j$ ) multiplied by their mixing ratio between river and aquifer water ( $\alpha_r$ ) and divided by the total velocity of all particles ( $v_k$ ). It is expressed as follows :

$$\alpha = \frac{\sum_{i=j} (v_j \times \alpha_{r,j})}{\sum_{i=k} v_k} \quad (6.2)$$

Where  $j$  correspond to particles originated from the stream, and  $k$  all disseminated particles. This method must be validated in order to prove its efficiency as a surrogate model to simulate SW-GW mixing ratio.



**Figure 6.2 :** Budget of a cell where a river condition is applied (particle endpoint)

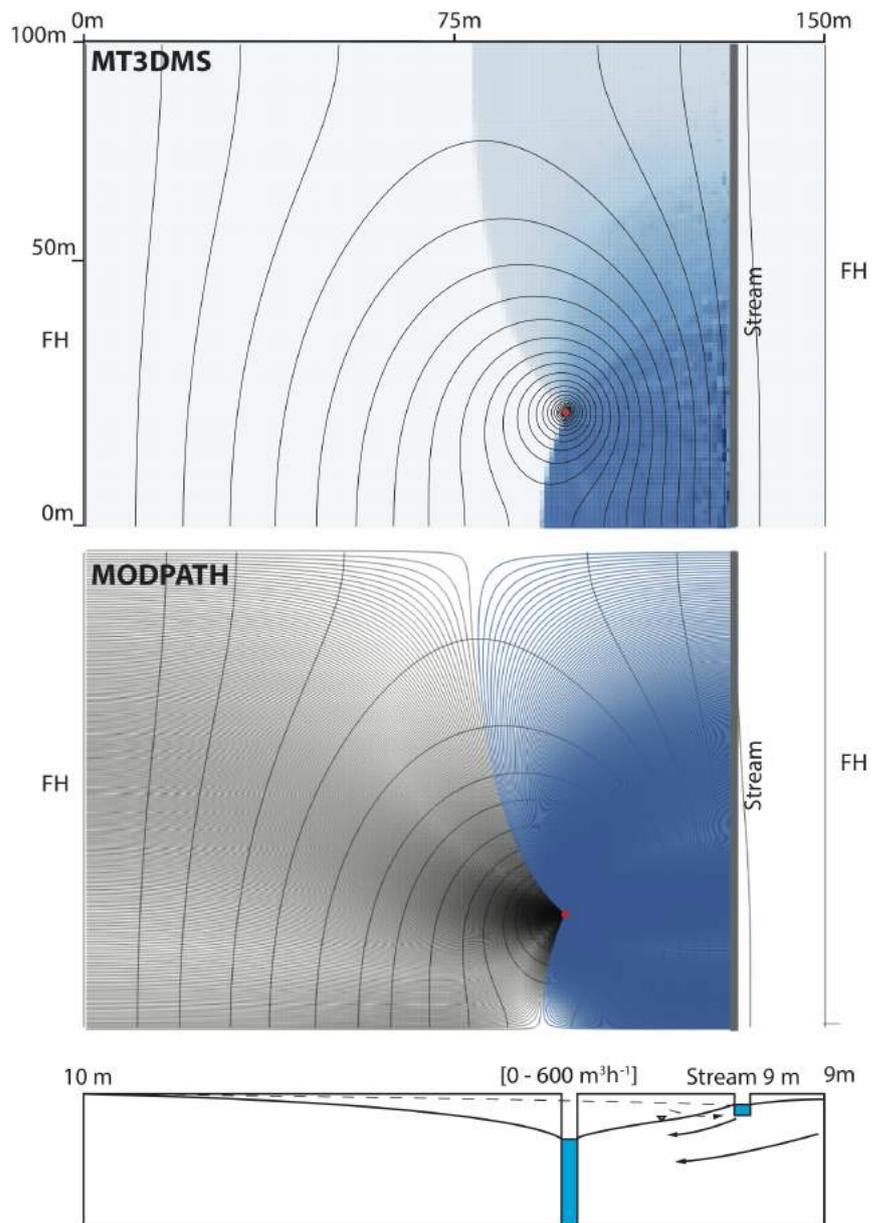
## 6.3 Validation

### 6.3.1 Synthetic Case

#### 6.3.1.1 Model Setting

A synthetic case is considered so as to validate the particle tracking surrogate model. The SW-GW mixing ratio in a sink point is simulated with a particle tracking code (MODPATH) and an advective-dispersive transport model MT3DMS code as well, from a steady-state flow model simulated with MODFLOW. Models (MODFLOW - MODPATH - MT3DMS) are pre- and post processed using the Python wrapper FloPy (Bakker et al., 2016) and Qgridder (Pryet et al., 2015a) on the Qgis platform (QGIS, 2012). A 2D rectangular domain ( $100 \times 150$  m), crossed by a stream is built with a regular mesh ( $1 \times 1$  m). Lateral boundary conditions are fixed head (FH) : 10 m to the left and 9.5 m to the right. Upper and lower boundary conditions are no flux boundary conditions. The stream is simulated with a head-dependent flux (Cauchy-type) boundary condition, with a head of 9 m and a river coefficient of  $0.01 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ . These boundary conditions have been selected so as to allow the mixing of water between SW and GW in river cells (see cross section in Figure 6.3). The hydraulic conductivity is homogeneous over the model with  $3 \times 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$ . Aquifer thickness is set to 30 m. Simulations have been conducted for a range of flow condition in the sink point from 0 to  $0.17 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$  (Figure 6.3).

The steady-state MODPATH model is performed with a set of 1000 particles disseminated around the well. For river condition, the weak sink option of the



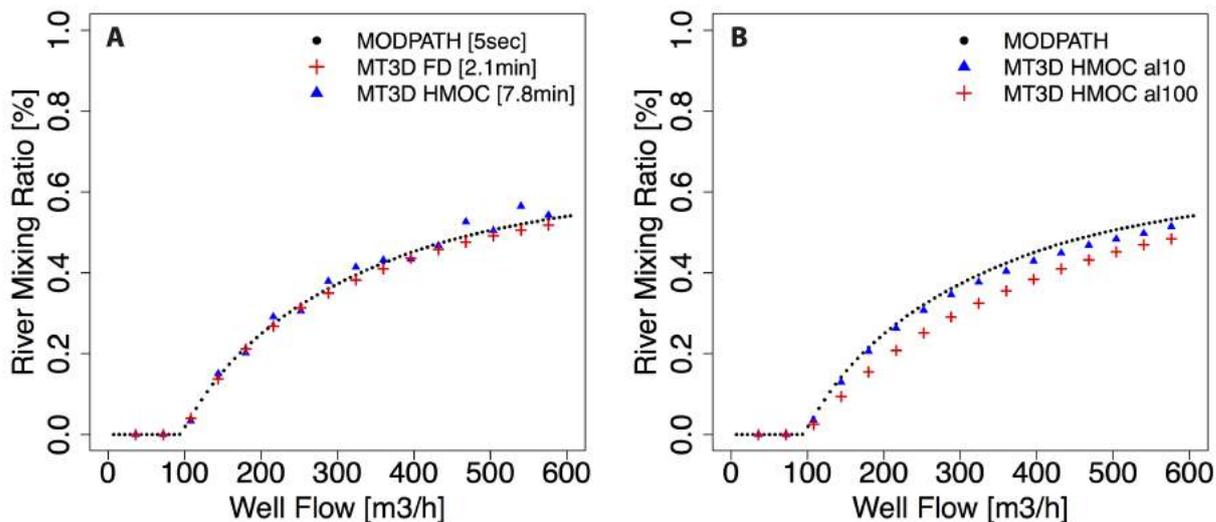
**Figure 6.3 :** MT3DMS and MODPATH simulations show mixing between surface water and groundwater, a crossed section describes model settings

MODPATH file is set to 1, which allows particles to pass through cells with weak sinks such as a stream in gaining condition. However, the weak source option is set to 2, which stops particles in cells with a weak source. Stream-aquifer mixing ratio is then obtained from the presented method.

The transient MT3DMS model is performed from a MODFLOW simulation of 50 steady-state simulations. A concentration of 1 is set in the river boundary condition and a concentration of 0 is set in all of the other cells and boundary conditions. MT3DMS simulations are performed with different solvers (FD, HMOC) with a longitudinal dispersion set to 1 m. The same simulations are also performed for a longitudinal dispersion set to 10 and 100 m with HMOC, so as to determine the impact of dispersion on simulated mixing ratio in a pumping well.

### 6.3.1.2 Results

MODPATH and MT3DMS simulated mixing ratio in the pumping well are compared in Figure 6.4. The MODPATH and MT3DMS models yield similar results



**Figure 6.4 :** The evolution of  $\alpha$  in sink point depending on sink point flow. A) With low dispersion set at 1 m, the accuracy of surrogate models is shown with a great gain of time B) with a longitudinal dispersion  $\alpha_L$  of 10 m and 100 m ( $\alpha_T = 0.1 \times \alpha_L$  for MT3MS simulations, simulated MR is still acceptable for the MODPATH surrogate model)

Figure 6.4, A) Below a pumping flow of  $100 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ , the head in the well stays above the head of the stream. Beyond this flow, a mix of stream water and water from the right boundary conditions supplies the well. These results validate the proposed approach in term of particle count, weighting of each particle velocity and the computation of the  $\alpha_r$  of river particles. Results obtained with a longitudinal dispersion of 10 m and 100 m reveal interesting features (Figure 6.4). In Figure 6.4 B) The same simulation as A is performed for MODPATH that cannot take into account dispersion. When dispersion is too large (100 m) the  $\alpha$  decreases, but it remains in the same order of magnitude as it does without taking into account dispersion. The error made on the  $\alpha$  by disregarding the effect of dispersion by the surrogate model, is about 6% for a longitudinal dispersion of 100 m. These results validate the simulation of  $\alpha$  in a pumping well in steady-state condition. Outside of the steady-state condition, and for a non sink point, dispersion could play a significant role (Faybishenko et al., 1995; Grubb, 1993). The performance of the surrogate model must now be demonstrated for the resolution of an heterogeneous SW-GW inverse problem.

## 6.3.2 Inverse Problem

### 6.3.2.1 Model settings

A highly parametrized synthetic model is developed to demonstrate the efficiency of the proposed surrogate model to improve SW-GW transport calibration. The presented test case is a SW-GW model in a randomly heterogeneous log-normal hydraulic conductivity field. The model seeks to simulate head and observed mixing ratios in pumping wells. Model settings are shown in Figure 6.5. The model domain is horizontal, two-dimensional and is discretized into 75 columns and 100 rows of 1 m (7 500 cells). Five sink points are set with a flow rate ranging from 1 to 5 of : 0.015, 0.06, 0.04, 0.1, 0.15 m<sup>3</sup> s<sup>-1</sup>. Lower and upper boundary conditions are fixed head with 10 and 9.5 m and stream is implemented with a head-dependent flux (Cauchy-type) boundary condition with a head of 9 m and a river coefficient of 0.5 m<sup>2</sup> s<sup>-1</sup>.

The heterogeneous hydraulic conductivity field is generated using a unconditional Gaussian simulation algorithm based on the GSTAT R package (Pebesma and Wesseling, 1998). This simulation is based on an exponential variogram with a range of 20 m, variance in the log domain is 0.8 and the nugget is set to 0.001. The transient MT3DMS model is performed from a MODFLOW simulation of 100 steady-state simulations so as to obtain the direct model output of head and mixing ratio  $\alpha$  at observation wells. A noise measurement has been added to direct model head observations with a normal random for a standard deviation of 5 cm. The following inverse model seeks to estimate model hydrodynamic parameters.

### 6.3.2.2 Inverse Modeling

Parameter estimation is first performed only against head observations. Thereafter, both head and mixing ratio observations are used for the parameter estimation with the developed particle-tracking surrogate model. The parameters to be calibrated are the river coefficient and the hydraulic conductivity field. The heterogeneous hydraulic conductivity field is represented using 266 pilot points, a calibration-adjustable parameter is associated with each of the pilot points (Figure 6.5). The hydraulic conductivity field is krigged using the same variogram as for the unconditional Gaussian simulation. The calibration was completed by using the parameter-estimation computer code PEST++ (Doherty et al., 1994; Welter et al., 2012) with the Gauss Levenberg Marquardt Algorithm (GLMA). Calibration processes are parallelized on 20 cores.

### 6.3.2.3 Results

The best objective function was achieved after seven iterations for the calibration against head only, and after 20 iterations for the calibration against head and mixing ratio with the surrogate MODPATH model. Objective function is calculated as :

$$\Phi = \sum_{i=1}^m (w_i r_i)^2 \quad (6.3)$$

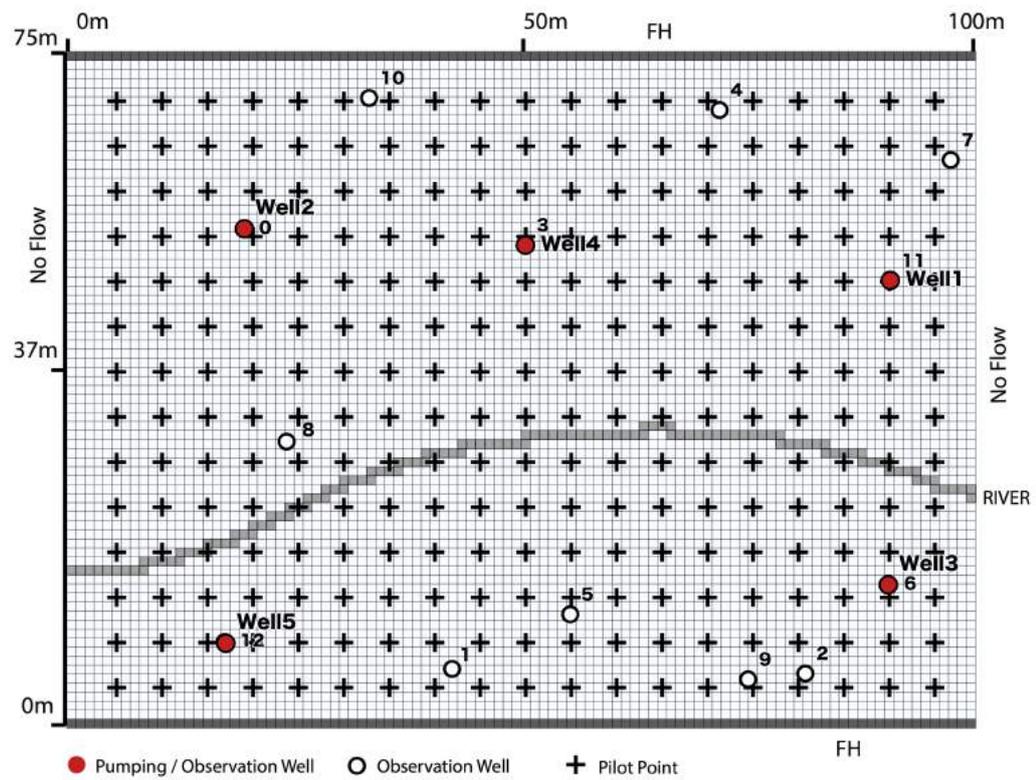


Figure 6.5 : Schematic diagram of the synthetic case

Model	Calibration Time	$\Phi H$	$\Phi H + \alpha$ surrogate	$\Phi H + \alpha$ MT3D	T RMSE
MODFLOW	5 min	2.2E-02	453	548	6160
MODFLOW + MODPATH	30 min	4E-01	3E-02	53	5660

**Tableau 6.1 :** Inverse modeling results : calibration time, final objective function of H, objective function of H +  $\alpha$  from the surrogate and MT3D model, and transmissivity RMSE

Where  $\Phi$  is the objective function,  $w_i$  is the weighting factor of the  $i$ 'th observations, and  $r_i$  expresses the difference between the model outcome and the measurement for the  $i$ 'th observation

Obtained  $\alpha$  are compared with the original MT3DMS model after calibration. Results of calibration are summarized in Table 6.1, in term of : calibration time ; head objective function ( $\Phi H$ ), and  $\alpha$  objective function obtained after the surrogate calibration ( $\Phi H + \alpha$  surrogate) and calculated with MT3DMS in post calibration ( $\Phi H + \alpha$  MT3D), and RMSE of calibrated hydraulic conductivity (T RMSE).

Surrogate model accurately reproduces observed  $\alpha$  with a total  $\Phi$  of 3E-02. Calculated  $\Phi$ , post calibration, with MT3DMS is of 53, which corresponds to a mean residual of 3% between observed and modeled  $\alpha$ . Whereas, a calibration against heads only gives an objective function of 548, which corresponds to a mean residual of 20% between observed and modeled  $\alpha$ .

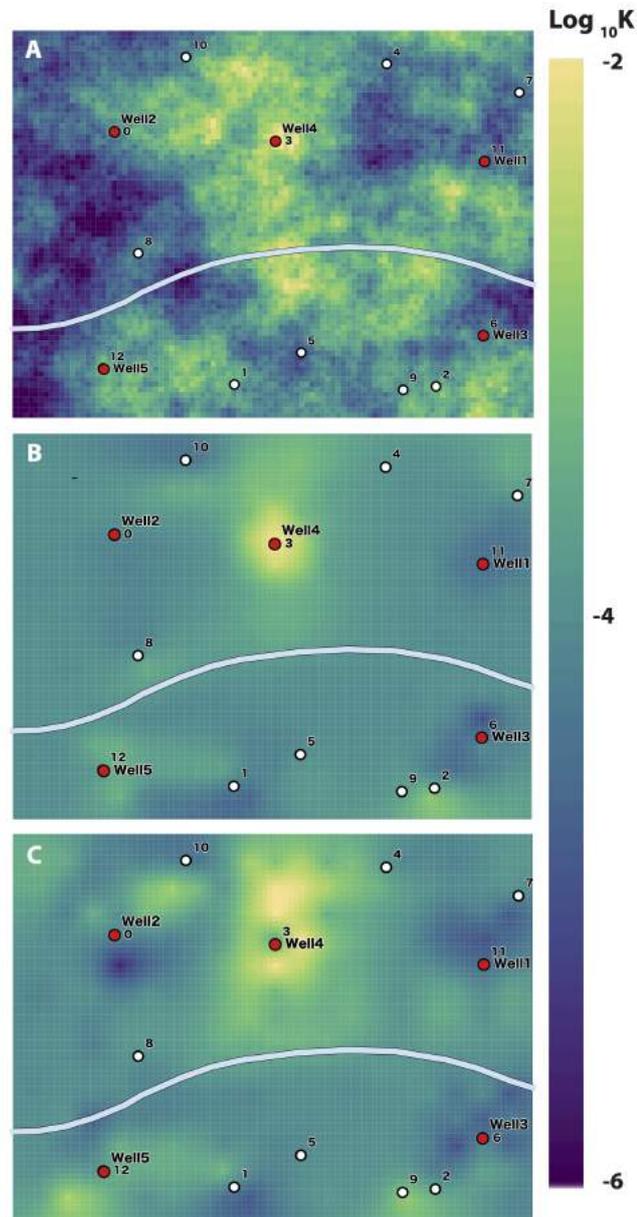
Real, and calibrated hydraulic conductivity fields are shown Figure 6.6.

Accepting the fact that a calibrated parameter field cannot claim to represent reality without a loss of detail(Moore and Doherty, 2006), calibrated fields are visually close to the real field with a gain of "details" for the hydraulic conductivity field calibrated with the surrogate model. So as to compare the two calibrated hydraulic conductivity fields, the RMSE has been calculated between observed and measured hydraulic conductivity cell by cell. The hydraulic conductivity field calibrated with the surrogate model against head and  $\alpha$  reduces the hydraulic conductivity field RMSE of 8.1% compared to head only.

In terms of gain of time, surrogate calibration needs a reasonable computation time with less than 1 hour. As the surrogate model seems to be between 20 and 90 faster than original MT3DMS model (Figure6.4), depending on MT3DMS solver. Indeed the same kind of calibration as presented, may need between 15 hours and more than two days to be completed. Therefore surrogate models is considerably time saving.

## 6.4 Discussion and Conclusions

The development of the proposed surrogate model was motivated by the need to include transport observation to improve SW-GW parameter estimation with realistic computational burden. It is now demonstrated that the presented me-



**Figure 6.6 :** Log of hydraulic conductivity field, observation wells (white) and pumping wells (red) A) "Real" hydraulic conductivity field obtained by unconditional Gaussian simulation, B) Calibrated hydraulic conductivity field against head observation only C) Calibrated hydraulic conductivity field against head and  $\alpha$  observations with the proposed surrogate model

thod is a relevant surrogate model to simulate SW-GW mixing observation and this method fulfills the requirement of the surrogates model criteria of Razavi et al. (2012) presented in the introduction.

The proposed surrogate model aims to improve SW-GW transport model calibration with additional field observations like mixing ratio, to achieve these, we developed a surrogate model so as to reduce computational cost of such simulation which is often too time consuming. The interest of such calibration improvement allows a better simulation of groundwater transport with a more realistic hydraulic conductivity field and SW-GW exchange parameters. Such surrogate methods help modelers adding different data types to calibrate a model, so as to reduce estimation error (Fleckenstein et al., 2010; Hunt et al., 2006; Sophocleous, 2002) This model does not have the vocation to replace original advective-dispersion models like MT3DMS, but to reduce computational cost of time extensive tasks like parameter calibration, optimization, uncertainty and sensitivity analysis that need thousands of model calls. However, original advection-dispersion models still needs to be used in direct modeling.

The principal limitation of the proposed method is related to the dispersion which is not taken into account. Dispersion can be taken into account with a random walk particle tracking method (Delay et al., 2005; Salamon et al., 2006) but which also demands much larger computation times. As demonstrated, dispersion effect is low for steady state SW-GW mixing in a pumping well, and can be neglected for surrogate simulations. The proposed method can either be extended to others steady-state sources, like a permanent pollution source. However, the proposed method cannot aim to simulate mixing ratio in a transient state where dispersion would play a significant role.

# Chapitre 7

## Estimation des paramètres et quantification des incertitudes

### 7.1 Introduction

Le problème direct, détaillé dans les chapitres précédents est contrôlé par de très nombreux paramètres, dont on ne connaît pas ou peu les valeurs (Chapitre 5). Il s'agit dans ce chapitre d'utiliser les observations disponibles pour estimer les paramètres. C'est la résolution du problème inverse.

Suite à une description de l'estimation des paramètres avec l'algorithme de Gauss Levenberg Marquart (GLMA), la mise en œuvre de l'estimation des paramètres à travers le code PEST++ est détaillée. Les résultats issus de cette étape sont ensuite décrits et assortis de la quantification des incertitudes associées par méthode linéaire et celle du Null Space Monte-Carlo (NSMC).

### 7.2 Estimation des paramètres dans les modèles hydrogéologiques

#### 7.2.1 Généralités

Les propriétés du système hydrogéologique que le modèle vise à simuler sont matérialisées par des paramètres, tels que la conductivité hydraulique, le coefficient d'emmagasinement, les conditions limites *etc.* Ces propriétés sont souvent hétérogènes et difficilement mesurables car en sous-sol. Le modélisateur peut cependant avoir une idée de la valeur de certains paramètres grâce à des travaux de terrain, de laboratoire ou de sa connaissance a priori du site. Cependant ces valeurs ne constituent souvent qu'une information ponctuelle dans l'espace, au vu d'un modèle bien plus vaste en deux- ou trois-dimensions. L'obtention d'une valeur d'un paramètre est alors un problème probabiliste puisque la valeur exacte d'un jeu de paramètre ne peut être connue, seule une estimation est exprimée, avec des bornes plus ou moins étendues encadrant la valeur (Doherty, 2015). Afin de proposer un modèle opérationnel et robuste, le modélisateur résout le problème

inverse, ce qui consiste à contraindre les paramètres du modèle avec les observations disponibles (Aster et al., 2005).

Le modèle direct permet de calculer l'état du système modélisé, charge hydraulique, concentration... basé sur une paramétrisation préalable du modèle. Le problème inverse vise à contraindre / estimer les paramètres inconnus du modèle en utilisant des observations de l'état du système (Tarantola, 2005). La résolution du problème inverse peut également permettre de mettre en exergue d'éventuelles erreurs ou imprécisions dans la conceptualisation du modèle (Zhou et al., 2014). La résolution du problème inverse est une étape essentielle. Aucune prédiction ne peut être faite sans une bonne caractérisation des paramètres du modèle et l'estimation de l'incertitude sur les variables prédites (Poeter and Hill, 1997).

L'estimation des paramètres peut être "manuelle" par essais erreurs ou algorithmique. L'étape manuelle est intéressante et nécessaire dans un premier temps pour se rendre compte de la sensibilité et de l'impact de tel ou tel paramètre, mais comporte souvent bien trop de limitations pour effectuer par la suite des prédictions fiables (Carrera and Neuman, 1986).

La résolution du problème inverse peut être soit directe soit indirecte. Dans la méthode directe les paramètres sont directement déduits par résolution de l'équation de l'écoulement sur la base de mesure de charge en chaque nœud du modèle (Emsellem and De Marsily, 1971). La difficulté d'obtenir une valeur de charge en chaque point conduit à des problèmes d'instabilité de la méthode directe, qui est aujourd'hui largement substituée par les méthodes indirectes (Zhou et al., 2014). L'approche indirecte consiste en une procédure d'ajustement des données de sortie du modèle sur les variables observées, cette procédure est appelé *history-matching*. La suite du document ne traitera que de l'approche indirecte de résolution du problème inverse.

Afin d'estimer la distribution des paramètres, l'approche bayésienne est idéalement la meilleure (Aster et al., 2005; Bernier et al., 2000; Oliver et al., 2008). A partir de tirages de Monte Carlo sur une distribution a priori des paramètres, une distribution a posteriori des paramètres est retenue conduisant à des valeurs simulées reproduisant raisonnablement les valeurs observées. Cependant la mise en œuvre de l'approche bayésienne est très coûteuse en temps de calcul pour les modèles contenant de très nombreux paramètres (fortement paramétrisés) nécessitant de nombreux appels de modèles (Zheng et al., 2002).

La méthode Gauss-Newton modifiée par Levenberg-Marquart est une des méthodes qui permet de résoudre un problème numérique par minimisation d'une fonction objectif (Aster et al., 2005). Cette méthode est plus économe en nombre d'appel de modèle que l'approche bayésienne et permet d'obtenir des résultats vraisemblables (Oliver et al., 2008). Elle est implémentée au sein de plusieurs codes de calculs parmi lesquels PEST est le plus employé (Anderson et al., 2015; Doherty, 2015; Fienen et al., 2009b) dont l'approche sera décrite par la suite.

La résolution du problème inverse comporte plusieurs écueils, en effet en modélisation hydrogéologique la résolution du problème inverse est quasi systématiquement "mal-posé" mathématiquement (*ill-posed*), dans le sens où il n'existe soit pas de solution au problème inverse soit pas de solution unique, ou que la solution est

instable face aux variations des données d'entrée du modèle (Carrera et al., 2005; Yeh, 1986). Le problème le plus courant dans la résolution du problème inverse en hydrogéologie étant la non-unicité de la solution (Zhou et al., 2014). Afin de pallier à ces problèmes, plusieurs solutions existent telles que la réduction du nombre de paramètres ou l'augmentation du nombre de données observées afin de réduire la sous-détermination (Hill and Tiedeman, 2006). Des méthodes de régularisation servent également à tendre vers un problème bien-posé. Par exemple, en ajoutant de l'information *a priori* (régularisation de Tikhonov) pour réduire l'espace dans lequel les paramètres peuvent varier (Tikhonov, 1963; Tonkin and Doherty, 2005), ou la régularisation mathématique par décomposition en valeurs propres (SVD) afin de réduire les variations lors des itérations d'optimisation (Tonkin and Doherty, 2005). La description de ces méthodes ainsi que leur implémentation dans le logiciel PEST++ sera décrite dans la section suivante.

## 7.2.2 Estimation des paramètres avec l'algorithme de Gauss Levemberg Marquart (GLMA)

### 7.2.2.1 Résolution du problème inverse pour un modèle linéaire

De manière générale, le problème inverse peut être représenté par la relation, entre le vecteur de paramètre  $\mathbf{b}$  et le vecteur d'observation  $\mathbf{c}$ , suivante (Aster et al., 2005) :

$$\mathbf{X}\mathbf{b} = \mathbf{c} \quad (7.1)$$

Où  $\mathbf{X}$  est une matrice de dimension  $m \times n$  correspondant au modèle linéaire, avec  $m$  le nombre d'observations, et  $n$  le nombre de paramètres. Si l'on dispose d'au moins autant d'observations que de paramètres le vecteur des paramètres  $\mathbf{b}$  se résout de la manière suivante :

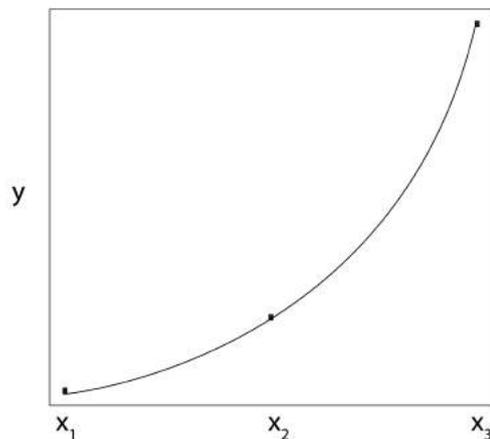
$$\mathbf{b} = (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \mathbf{c} \quad (7.2)$$

Seulement, les modèles hydrogéologiques ne sont pas souvent linéaires et l'on dispose rarement d'autant d'observations que de paramètres.

### 7.2.2.2 Estimation des paramètres pour un modèle non linéaire (méthode de Newton)

Lorsqu'un modèle est non-linéaire il n'est pas possible de minimiser la fonction objectif à partir de l'équation 7.2. Le modèle doit alors être localement linéarisé à partir de l'approximation de Taylor. La mise en œuvre de l'approximation de Taylor permet de générer un vecteur d'observation  $\mathbf{c}$  correspondant à un vecteur de paramètre  $\mathbf{b}$  légèrement différent du vecteur initial de paramètre  $\mathbf{b}_0$ . La relation de Taylor suivante est souvent admise :

$$\mathbf{c} = \mathbf{c}_0 + \mathbf{J}(\mathbf{b} - \mathbf{b}_0) \quad (7.3)$$



**Figure 7.1 :** Calcul de la dérivée d'une observation par rapport à un paramètre par la méthode centrale, en trois point, pour le calcul de la jacobienne par la méthode des perturbations

Où  $\mathbf{J}$  est la matrice jacobienne telle que :

$$\mathbf{J}_{i,j} = \frac{\partial c_i}{\partial b_j} \quad (7.4)$$

Où  $\mathbf{J}$  est la matrice jacobienne comprenant  $m$  lignes (une pour chaque observation), les  $n$  éléments de chaque lignes étant les dérivés d'une observation par rapport à chacun des  $n$  paramètres. Plusieurs méthodes peuvent être employées pour calculer la matrice jacobienne (Yeh, 1986), dont la méthode par "perturbation" qui fonctionne en incrémentant positivement et/ou négativement chaque paramètre autour de sa valeur centrale. Cette méthode requiert  $n + 1$  exécutions de modèle pour le calcul de la dérivée en deux points,  $2n + 1$  en trois points. Pour le calcul en trois points, la dérivée est calculée à partir d'un polynôme du second degré (Figure 7.1) avec pour le paramètre  $n$  et l'observation  $m$  :

$$\frac{\partial c_m}{\partial b_n} = 2ax_2 + b \quad (7.5)$$

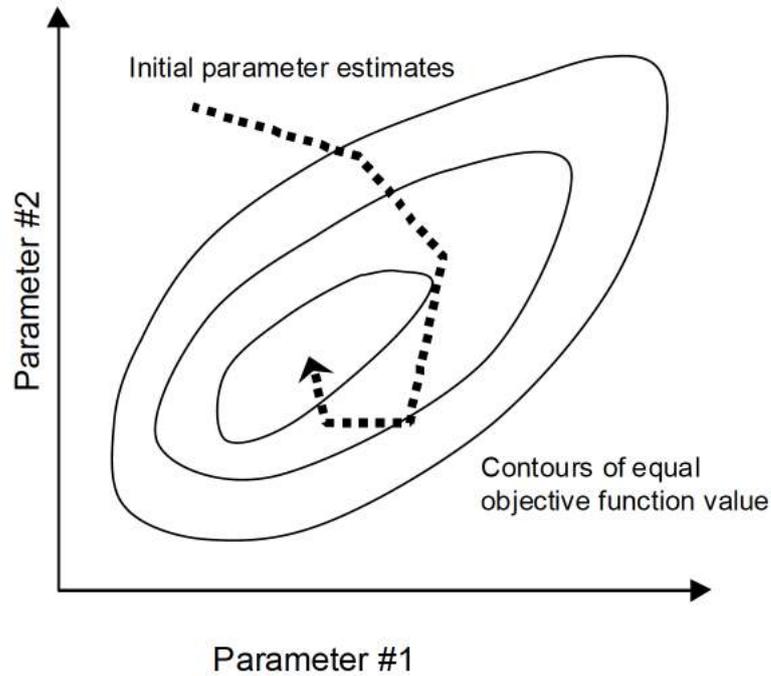
Ainsi, comme pour le modèle linéaire l'équation 7.3 se résout de la manière suivante :

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_0 + \mathbf{u} \quad (7.6)$$

avec :

$$\mathbf{u} = (\mathbf{J}^t \mathbf{Q} \mathbf{J})^{-1} \mathbf{J}^t \mathbf{Q} (\mathbf{c} - \mathbf{c}_0) \quad (7.7)$$

Où  $\mathbf{u}$  est le vecteur de mise à jour des paramètres,  $\mathbf{Q}$  est la matrice diagonale contenant le carré des facteurs de pondération des observations  $w_i$ . Étant donné que ce processus est basé sur une linéarisation du modèle le résultat ne peut être



**Figure 7.2 :** Amélioration itérative des valeurs des paramètres initiaux vers le minimum global de la fonction objectif d'après Doherty et al. (1994)

directement obtenue. Ainsi un processus itératif doit être mis en place pour répéter cette opération jusqu'à minimisation d'une fonction objectif (Figure 7.2)

### 7.2.2.3 Calcul du gradient

L'algorithme GLMA est basée sur le principe de minimisation d'une fonction objectif. La fonction objectif  $\Phi$  correspond à la somme des carrés des résidus pondérés entre variables simulées par le modèle et observées :

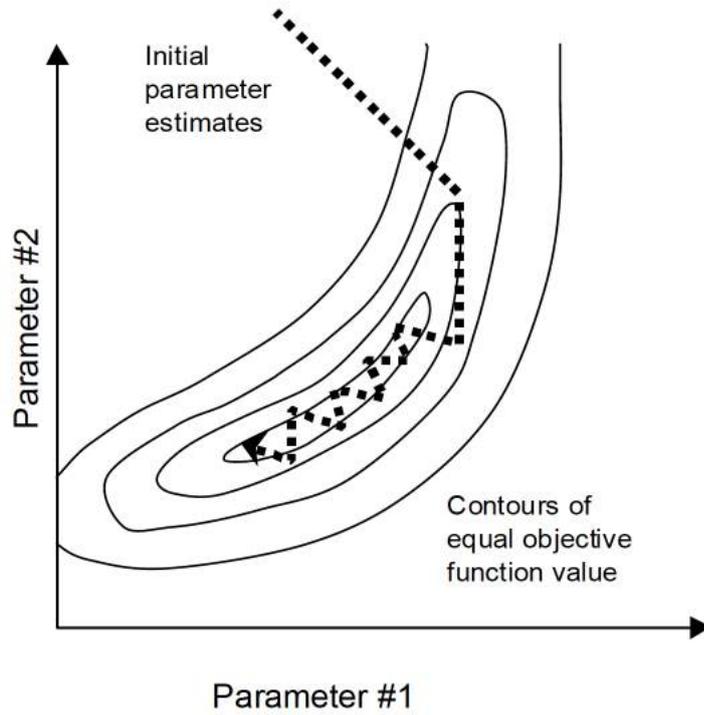
$$\Phi = (\mathbf{c} - \mathbf{X}\mathbf{b})^t \mathbf{Q} (\mathbf{c} - \mathbf{X}\mathbf{b}) \quad (7.8)$$

ce qui revient aussi à :

$$\Phi = \sum_{i=1}^m (w_i r_i)^2 \quad (7.9)$$

où  $\Phi$  est la fonction objectif à minimiser,  $\mathbf{Q}$  est la matrice diagonale contenant le carré des facteurs de pondération des observations  $w_i$ , et  $r_i$  le résidus entre variables simulées pas le modèle et observées.

Le direction et le sens de minimisation de la fonction objectif doivent être calculés à partir du gradient de la fonction objectif. Le gradient de la fonction objectif dans l'espace des paramètres est calculé par le vecteur  $\mathbf{g}$  tel que le  $i^{eme}$  élément



**Figure 7.3 :** Phénomène d'"hemistitching" d'après Doherty et al. (1994)

du vecteur  $\mathbf{g}$  est défini par :

$$\mathbf{g}_i = \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{b}_i} \quad (7.10)$$

Où  $\mathbf{g}$  peut être calculé grâce à la matrice jacobienne de la manière suivante :

$$\mathbf{g} = -2\mathbf{J}^t \mathbf{Q} \mathbf{r} \quad (7.11)$$

$-\mathbf{g}$  est défini comme étant la direction de plus grande pente de descente de la fonction objectif  $\Phi$ . Cependant le vecteur de mise à jour des paramètres  $\mathbf{u}$  peut être un meilleur paramètre de mise à jour que la direction  $-\mathbf{g}$ , surtout lorsque les paramètres sont fortement corrélés (Doherty et al., 1994). En effet suivre la direction de plus grande pente peut conduire au phénomène d'"hemistitching" lorsque les paramètres "sautent" de part et d'autre du domaine où la fonction objectif atteint son minimum (Figure 7.3).

Afin d'éviter ce problème, le paramètre "Marquardt" ( $\alpha$ ) permet d'ajuster le vecteur  $\mathbf{u}$  tel que :

$$\mathbf{u} = (\mathbf{J}^t \mathbf{Q} \mathbf{J} + \alpha \mathbf{I})^{-1} \mathbf{J}^t \mathbf{Q} \mathbf{r} \quad (7.12)$$

Où  $\mathbf{I}$  est la matrice d'identité  $n \times n$ . Ainsi plus  $\alpha$  est grand plus la direction  $\mathbf{u}$  se rapproche de la plus grande pente  $-\mathbf{g}$  et inversement. Ainsi lorsque le vecteur de paramètre se rapproche de l'optimum de  $\Phi$  il vaut mieux utiliser des valeurs faibles de  $\alpha$  afin d'éviter les phénomènes d'"hemistitching" (Figure 7.3).

Souvent les problèmes inverses impliquent différents types d'observation et de paramètres dont les grandeurs peuvent considérablement varier, ainsi les éléments de la matrice jacobienne  $\mathbf{J}$  peuvent être de grandeur très variable. Ainsi si le vecteur de mise à jour  $\mathbf{u}$  est calculé par l'Equation 7.12 cela peut mener à des problèmes d'arrondis. Ce problème peut alors être résolu par l'utilisation d'une matrice de mise à l'échelle  $\mathbf{S}$ ; une matrice carrée  $n \times n$  composée d'éléments diagonaux, dont le  $i^{eme}$  élément diagonal de  $\mathbf{S}$  est donné par :

$$\mathbf{S}_{ii} = (\mathbf{J}^t \mathbf{Q} \mathbf{J})_{ii}^{-1/2} \quad (7.13)$$

Ainsi avec l'instruction du vecteur de mise à l'échelle  $\mathbf{S}$  dans l'équation 7.12, l'équation suivante est obtenue pour  $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{u}$  :

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{u} = ((\mathbf{J}\mathbf{S})^t \mathbf{Q} \mathbf{J} \mathbf{S} + \alpha \mathbf{S}^t \mathbf{S})^{-1} (\mathbf{J}\mathbf{S})^t \mathbf{Q} r \quad (7.14)$$

Cette équation est mathématiquement équivalente à l'équation 7.12 mais plus performante d'un point de vue numérique (Doherty, 2010).

L'élément le plus élevé de la matrice  $\alpha \mathbf{S}^t \mathbf{S}$  est appelé le "Marquart lambda" noté  $\lambda$ , permettant d'ajuster la direction du vecteur  $\mathbf{u}$ .

Maintenant que le paramètre Marquart permet d'orienter le vecteur  $\mathbf{u}$ , la magnitude de ce vecteur doit également être optimale. La magnitude optimale du vecteur  $\mathbf{u}$ , noté  $\beta$  est calculée ainsi (Doherty et al., 1994) :

$$\beta = \frac{\sum_{i=1}^m (\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_{0i}) w_i^2 \gamma_i}{\sum_{i=1}^m (w_i \gamma_i)^2} \quad (7.15)$$

avec :

$$\gamma = \mathbf{J} \mathbf{u} \quad (7.16)$$

Ainsi si  $\mathbf{b}_0$  représente le jeu de paramètres actuel, le jeu mis à jour est calculé de la manière suivante :

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_0 + \beta \mathbf{u} \quad (7.17)$$

L'algorithme GLMA ne converge pas vers la même solution pour différents points de départ si le problème est mal posé, ce qui est presque tout le temps le cas (Carrera et al., 2005). Des techniques de régularisation permettent de stabiliser la solution

### 7.2.3 Régularisation

La régularisation de Tikhonov (Tikhonov, 1963) et la décomposition en valeur propre (SVD pour *Singular Value Decomposition*) (Tonkin and Doherty, 2005) sont utilisées dans le but de stabiliser la solution du problème inverse.

### 7.2.3.1 Régularisation de Tikhonov

La régularisation de Tikhonov permet l'ajout d'informations a priori dans le processus de calibration afin de promouvoir une solution unique au problème inverse. Cette régularisation permet de faire tendre la valeurs des paramètres estimés vers les valeur "préférées" par le modélisateur, pouvant provenir d'information a priori ou de connaissances d'expert. L'équation de régularisation comprend une fonction objectif de régularisation qui est minimisée en parallèle de la fonction objectif de mesure. Pour rappel la fonction objectif de mesure est définie telle que :

$$\Phi_m = (\mathbf{c} - \mathbf{X}\mathbf{b})^t \mathbf{Q}_m (\mathbf{c} - \mathbf{X}\mathbf{b}) \quad (7.18)$$

où l'indice  $m$  introduit dans cette équation par rapport à l'équation 7.8 signifie "mesure". Lors de la régularisation de Tikhonov une fonction objectif de régularisation  $\Phi_r$  doit également être minimisée par le jeu de paramètre estimé par l'algorithme elle est ainsi définie par :

$$\Phi_r = (\mathbf{d} - \mathbf{Z}\mathbf{b})^t \mathbf{Q}_r (\mathbf{d} - \mathbf{Z}\mathbf{b}) \quad (7.19)$$

Où  $\mathbf{Q}_r$  est la matrice diagonale comprenant le carré des facteurs de pondérations des valeurs "préférées" de régularisation  $\mathbf{d}$ ,  $\mathbf{Z}$  est la matrice exprimant l'équation de régularisation. Ainsi une fonction objectif totale comprenant la fonction objectif de mesure  $\Phi_m$  et la fonction objectif de régularisation  $\Phi_r$  est définie par l'équation suivante :

$$\Phi_t = \Phi_r + \gamma \Phi_m \quad (7.20)$$

Où  $\gamma$  est le multiplicateur Lagrangien de pondération de la régularisation.  $\gamma$  est calculé à chaque itération en fonction de la valeur de la fonction objectif cible.

### 7.2.3.2 Décomposition en valeurs propres tronquée (TSVD)

La méthode TSVD permet de supprimer les paramètres insensibles, ou groupes de paramètres corrélés, qui ne sont pas ou mal contraints par les observations disponibles. Ces paramètres ou combinaisons linéaires de paramètres sont identifiés à travers la décomposition en valeurs propres de la matrice jacobienne (Aster et al., 2005; Tonkin and Doherty, 2005). Les valeurs propres et vecteurs propres sont obtenus par décomposition de la matrice jacobienne  $\mathbf{J}$  (Moore and Doherty, 2005) :

$$\mathbf{J}^t \mathbf{Q} \mathbf{J} = \mathbf{V} \mathbf{E} \mathbf{V}^t \quad (7.21)$$

Où  $\mathbf{V}$  est la matrice des vecteurs propres de la matrice  $\mathbf{J}^t \mathbf{Q} \mathbf{J}$ , et  $\mathbf{E}$  est la matrice diagonale où l'on retrouve les valeurs propres de la matrice  $\mathbf{J}^t \mathbf{Q} \mathbf{J}$ . Le vecteur propre  $\mathbf{V}$  peut être subdivisé en deux groupes  $\mathbf{V1}$  et  $\mathbf{V2}$ , où le premier comporte les vecteurs propres correspondant aux valeurs propres à un certain seuil de troncature (*eigenvalue ratio threshold*) préalablement définit, et le deuxième

comporte les vecteurs propres restants. Ainsi tous les vecteurs propres inférieurs à un certain seuil de troncature seront assignés d'une valeur nulle et ne sont pas pris en compte dans l'estimation des paramètres. Ainsi, chaque paramètre qui ne peut pas être contraint est considéré comme étant dans l'"espace nul" (*null space*) de calibration n'est plus mis à jour lors des itérations successives.

#### 7.2.4 Approche des points pilotes

La subjectivité de la simplification habituelle des paramètres hydrodynamiques, telle que la zonation lorsqu'elle n'est pas basé sur un modèle géologique déterministe, introduit d'importantes erreurs structurelles (Anderson et al., 2015).

Dans l'approche des points pilotes, la valeur des paramètres spatialisés (transmissivité, coefficient d'emménagement) est estimée au niveau de point pilotes distribués sur le domaine du modèle et étendus à chaque cellule par interpolation (de Marsily et al., 1984). L'utilisation de points pilotes permet d'accroître la flexibilité spatiale dans la paramétrisation du modèle, et permet ainsi au processus de calibration d'extraire plus d'information des données d'observations afin de compenser en partie certaines erreurs structurelles du modèle (Doherty and Welter, 2010; Hunt et al., 2007). Cependant le gain de flexibilité amené par une augmentation du nombre de paramètres peut également mener à des problèmes d'insensibilité ou de corrélations entre paramètres, la non unicité de la solution et un problème inverse "mal posé". La régularisation peut résoudre en partie ce problème en facilitant une solution stable et unique au problème inverse (Aster et al., 2005).

#### 7.2.5 PEST++

La méthode GLMA, ainsi que les techniques de régularisation présentées sont implémentées au sein de l'algorithme d'estimation PEST++ (Welter et al., 2012). PEST++ s'inscrit dans la lignée des codes d'estimation des paramètres par régression non linéaire, tels que UCODE (Poeter and Hill, 1999) et PEST (Doherty et al., 1994). PEST++ est écrit en C++ et est une ré-écriture complète de l'algorithme de PEST, largement utilisé au sein de la communauté de modélisateur et initialement développé en Fortran par Doherty et al. (1994). Les logiciels PEST et PEST++ sont libres, gratuits et bien documentés. Les fichiers sont compatibles entre PEST et PEST++, les différences entre les deux logiciels sont décrites dans Welter et al. (2012). De manière générale PEST++ est annoncé comme plus robuste, plus rapide que PEST et avec de nouvelles fonctions intégrées. De plus, les calculs sont désormais plus facilement parallélisables sur plusieurs stations de calculs en réseau, facilitant l'estimation des paramètres des modèles hautement paramétrisés ou de nombreuses exécutions de modèle sont nécessaires.

### 7.2.5.1 Calcul de la matrice jacobienne

La matrice jacobienne (Équation 7.4) est calculée dans PEST++ par la méthode de perturbation (Doherty, 2010). D'abord la dérivée a été calculé avec deux points demandant ainsi  $n + 1$  exécutions de modèle (pour  $n$  paramètres). Ce procédé de calcul de la dérivée ne permettant pas de converger vers un optimum satisfaisant, un calcul en trois points de la dérivée à partir d'un polynôme (voir Équation 7.2.2.2 ) nous a permis de régler ce problème avec comme conséquence un nombre supérieur d'exécutions de modèle ( $2n + 1$ ).

### 7.2.5.2 Régularisation de Tikhonov

Nous avons vu que le multiplicateur lagrangien de pondération de la régularisation ( $\gamma$ ) permet de réguler la valeur de la fonction objectif cible. Ce multiplicateur lagrangien, décrit par la variable PHIMLIM dans PEST++, contrôle le compromis entre l'ajustement avec les observations (minimisation de la fonction objectif de mesure) et l'ajustement du champ de paramètre en accord avec l'information a priori (minimisation de la fonction objectif de régularisation). PHIMLIM est la variable de contrôle majeure de la régularisation dans PEST++ (Doherty, 2003; Fienen et al., 2009b). Une valeur de PHIMLIM trop faible favorise un champ de paramètre irréaliste par un "sur-ajustement" sur les observations, à l'inverse avec une valeur de PHIMLIM trop élevée, cela va favoriser un trop fort rapprochement du champ de paramètre préféré au détriment de l'information apportée par les observations. Aucune méthode rapide et robuste n'existe pour déterminer correctement une valeur de PHIMLIM (Fienen et al., 2009b), cependant plusieurs conseils ont été proposés par Anderson et al. (2015) et Fienen et al. (2009b). Une valeur légèrement supérieure ( $\simeq 10\%$ ) à la meilleure valeur de la fonction objectif de mesure atteinte sans régularisation peut théoriquement constituer une bonne première valeur de PHIMLIM. Par la suite une valeur de PHIMLIM peut être ajustée en fonction de ce que le modélisateur juge comme étant un ajustement "suffisamment bon" des fonctions objectif de mesure et de régularisation.

L'information a priori a été incorporée dans le processus de calibration comme valeur préférée pour l'ensemble des paramètres soumis à la calibration. Identique à la valeur initiale, elles sont présentées dans le tableau 7.2.

### 7.2.5.3 Régularisation TSVD

La définition d'un seuil de troncature (*eigenvalue ratio threshold*) est nécessaire à l'utilisation de la méthode de régularisation mathématique TSVD. Un seuil de troncature compris entre  $10^{-6}$  et  $10^{-7}$  est généralement admis pour marquer la limite entre l'espace des solutions et l'espace nul (Doherty et al., 2011; Fienen et al., 2009b), nous avons choisi un seuil de  $10^{-7}$  entre l'espace des solutions et l'espace nul.

## 7.3 Mise en œuvre de l'estimation des paramètres

### 7.3.1 Observations

Les observations suivantes sont utilisées pour l'estimation des paramètres :

- les charges provenant de l'instrumentation des piézomètres et des ouvrages de prélèvement du site équipés de sonde DIVER ;
- débit de production des ouvrages Galerie de Gamarde et Barbacane de la base de données SUEZ environnement ;
- rapport de mélange eaux de surface - eaux souterraines déduit des campagnes géochimiques pour les ouvrages R20, R21 et le point Rth de la galerie (Rappel : le point Rth ne représente qu'une part faible de l'eau produite par l'ouvrage Galerie puisque le pompage est effectué au niveau du point EB).

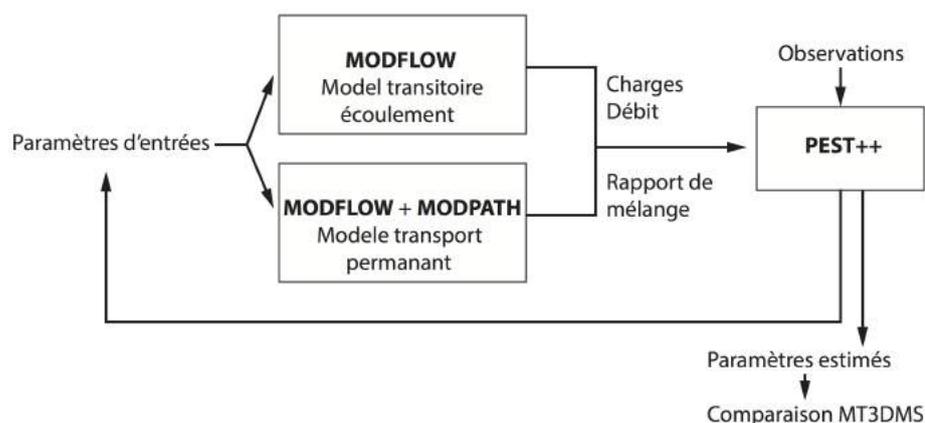
### 7.3.2 Approche d'estimation des paramètres

Dans cette étude, l'estimation des paramètres du modèle précédemment décrit, est réalisée vis-à-vis d'observations de charges, de débits de drainages des galeries et de rapports de mélange entre les eaux de surface et les eaux souterraines aux ouvrages de production. Plusieurs types de données d'observation sont utilisées dans le but de mieux contraindre les paramètres du modèle (Hunt et al., 2006). Le chapitre précédent a mis en évidence la difficulté d'utiliser des observations de transport pour l'estimation des paramètres au vu des temps de calcul trop importants des modèles d'advection-dispersion classiques (e.g MT3DMS). Le modèle équivalent, basé sur le suivi de particules développé dans le chapitre 6 nous permet de pallier à ce problème, mais seulement à partir d'un modèle d'écoulement en régime permanent. Les chroniques de charge dont nous disposons nous permettent d'estimer les paramètres à partir d'un modèle transitoire et ainsi d'augmenter le nombre d'observations pour mieux contraindre les paramètres.

Ainsi deux approches vont servir à l'estimation des paramètres :

- **approche n°1** : un modèle transitoire d'écoulement dont les sorties sont les charges et les débits produits des drains (galerie et barbacanes) ;
- **approche n°2** : un modèle transitoire d'écoulement dont les sorties sont les charges et les débits produits des drains (galerie et barbacanes) + un modèle permanent d'écoulement et de suivi de particules associé (modèle équivalent précédemment développé), dont les sorties sont les rapports de mélange entre les eaux de surface et les eaux souterraines aux ouvrages de production (Figure 7.4).

Les résultats de la simulation des observations de rapport de mélange réalisés avec le modèle équivalent seront validés, suite à l'étape d'estimation des paramètres, par comparaison avec le modèle classique d'advection-dispersion MT3DMS.



**Figure 7.4** : Estimation des paramètres avec l'approche n°2 : deux modèles sont exécutés en fonction des données d'entrées (variables, paramètres), les sorties des modèles sont comparées aux observations et traitées par PEST++ qui ajuste les données d'entrées pour minimiser la fonction objectif, les paramètres ensuite estimés sont comparés au modèle original d'advection dispersion MT3DMS

### 7.3.2.1 Traitement des observations

Les observations de charge ont été ré-échantillonnées au pas de temps journalier (moyenne journalière des données observées au pas de temps 6 min) afin de correspondre au pas de temps de calcul du modèle. Le même traitement a été appliqué aux données de débits. Les observations des rapports de mélange entre les eaux de surface et les eaux souterraines proviennent de trois campagnes géochimiques, deux de ces campagnes ont été réalisées dans les mêmes conditions hydrologiques début octobre 2014 et 2015, et une autre en avril 2015. Ces trois campagnes présentent des valeurs similaires de rapport de mélange, cependant, seules les observations de la dernière campagne effectuée en octobre 2015 seront utilisées car elles se rapprochent au plus du schéma de production conduit à l'heure actuelle par les services de production d'eau.

### 7.3.2.2 Pondération des observations

Pour la phase de résolution du problème inverse par l'algorithme PEST++, le poids des observations doit préférablement être ajusté pour prendre en compte des considérations telles que le besoin d'équilibre et de représentativité des différents types d'observation (charges, flux, *etc*), la distribution spatiale (Bourgault, 1997), et l'importance des observations pour les besoins du modèle (proches ou éloignées de la zone d'intérêt par exemple) (Anderson et al., 2015).

Nous sommes face à une fonction objectif hybride prenant en compte divers types d'observations, ayant différentes unités et différents ordres de grandeur. Afin de répondre au besoin d'équilibre et de représentativité des différents types d'observation, les observations de charge ( $h$ ) sont toutes pondérées d'un poids de 1, les

observations de débit ( $q$ ) de production d'un poids de 0.01 et les observations de rapport de mélange ( $\alpha$ ) d'un poids de 100. Ces poids permettent un bon équilibre entre les différentes observations dans la fonction objectif. Les fonction objectif des deux approches sont donc défini par :

approche n°1 :

$$\Phi_1 = \sum_{i=1}^m (h_{obs,i} - h_{sim,i})^2 + \sum_{i=1}^m (0.01(q_{obs,i} - q_{sim,i}))^2 \quad (7.22)$$

approche n°2 :

$$\Phi_1 = \sum_{i=1}^m (h_{obs,i} - h_{sim,i})^2 + \sum_{i=1}^m (0.01(q_{obs,i} - q_{sim,i}))^2 + \sum_{i=1}^m (100(\alpha_{obs,i} - \alpha_{sim,i}))^2 \quad (7.23)$$

### 7.3.3 Paramétrisation

La traduction des propriétés du système réel au sein du modèle numérique nécessite d'assigner une valeur de paramètre à chaque cellule de la grille. Pour les besoins de la calibration, l'ensemble des paramètres du modèle est réduit en paramètre à calibrer, amenés à varier pendant la phase de calibration. Cette étape de paramétrisation dépend en partie des données disponibles et du jugement du modélisateur (Anderson et al., 2015). Idéalement le nombre de paramètres doit être inférieur au nombre d'observations afin de tendre vers un problème inverse sur-déterminé et mathématiquement bien posé (well-posed) (Hill and Tiedeman, 2006; Zhou et al., 2014). Cependant, la réduction du nombre de paramètres à calibrer nécessite souvent des simplifications subjectives de la part du modélisateur pouvant conduire à des erreurs structurales importantes (Doherty and Welter, 2010). Le choix de modèle hautement paramétrisé (contenant beaucoup de paramètre *highly parametrized model*) a été fait afin d'éviter la sur-simplification du modèle et d'accroître ses performances. Le problème inverse est alors dit sous-déterminé et mal posé, afin qu'il puisse être résolu les paramètres seront contraints par régularisation mathématique (Tonkin and Doherty, 2005). L'approche de paramétrisation choisie est présentée au travers du Tableau 7.2.

Les paramètres des conditions limites externes et internes (rivières et drains) sont homogènes et linéaires le long de chaque condition limite, la recharge est également homogène sur la zone modélisée, pour plus de détail sur la construction du modèle se référer au Chapitre 5.

Compte tenue de l'hétérogénéité observée des propriétés hydrodynamiques de l'aquifère, celles-ci sont représentés aux travers de points pilotes (de Marsily et al., 1984; Doherty, 2003).

Tous les paramètres ont été log-transformés (base 10) afin de stabiliser le processus d'inversion, et d'empêcher les valeurs négatives (Doherty et al., 2011).

Paramètre	Transformation paramétrisation	Valeur a priori	Borne inf.	Borne sup.	Obtention	Nombre	
<b>Condition limites externes</b>							
$C_{GHB\_N}$ [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ]	Log	1E-2	1E-10	1	Déduit de $T(C = T/L)$	1	
$H_{GHB\_N}$ [m]	Fixée	12	-	-	Modèles H_CUB (Cabaret, 2011) & Piézométrie (ADES)	0	
$C_{GHB\_S}$ [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ]	Log	1E-2	1E-10	1	Déduit de $T(C = T/L)$	1	
$H_{GHB\_S}$ [m]	Fixée	10	-	-	Modèles H_CUB (Cabaret, 2011) & Piézométrie (ADES)	0	
<b>Recharge</b>							
$CRT$ [mm]	Log	90	76	130	Littérature, modèle Seine (Pryet et al., 2015b)	1	
$DCRT$ [mm]	Fixée	75	-	-	-	0	
$FN$ [mm]	Log	15	5	30	-	1	
$Q_{Imax}$ [mm]	Fixée	10	-	-	-	0	
$QR_{max}$ [mm]	Fixée	0.1	-	-	-	0	
$C_{QI}$ [ $\text{d}^{-1}$ ]	Fixée	0.1	-	-	-	0	
$C_{QR}$ [ $\text{d}^{-1}$ ]	Fixée	0.1	-	-	-	0	
<b>Rivières</b>							
$C_{RIV\_Jalle}$ [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ]	Log	8,84E-3	1E-10	1	Outil $C_{RIV}$ développé, distribution probabiliste	1	
$C_{RIV\_Ru}$ [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ]	Log	4,4E-3	1E-10	1	-	1	
<b>Drains</b>							
$C_{Galerie}$ [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ]	Log	1E-1	1E-10	1	Valeur obtenue de l'outil $C_{RIV}$ développé	1	
$C_{Barbacanes}$ [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ]	Log	1E-1	1E-10	1	-	1	
<b>Paramètres hydrodynamiques</b>							
$T$ [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ]	Log	Points pilotes	1E-2	1E-4	1	Essai par pompage	251
$S$ [-]	Log	-	0.2	1E-1	1	Connaissance a priori, littérature	251
<b>Total : 510</b>							

Tableau 7.1 : Paramétrisation du modèle d'écoulement et de transport

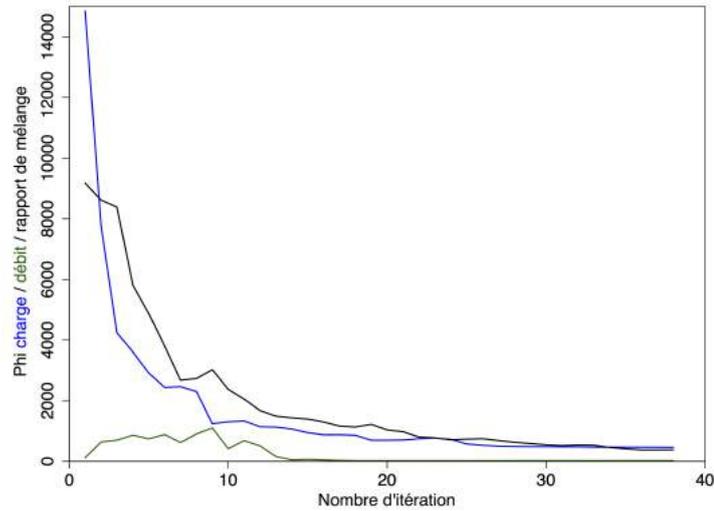
### 7.3.3.1 Paramétrisation des propriétés hydrodynamiques

En tout 657 points pilotes sont distribués sur le domaine modélisé pour représenter la transmissivité et la porosité de drainage, 406 sont liés entre eux (car dépourvus d'observations proches et éloignés de la zone d'intérêt) pour ne former qu'un seul paramètre portant le nombre total de points pilotes ajustables à 251 (Figure 7.5).

La paramétrisation des points pilotes a été faite en suivant les recommandations de Doherty et al. (2011) dans le guide *Background and Issues Regarding Use of Pilot Points* basé sur des tests numériques des points pilotes. Pour la localisation des points pilotes : i) emplacement uniforme des points pilotes, avec ajout de points pilotes dans la zone d'intérêt en respectant un écart entre points pilotes selon l'étendue caractéristique supposée de l'hétérogénéité des propriétés hydrodynamiques, ii) les points pilotes sont placés à proximité et entre chaque point d'observation, iii) placer des points pilotes entre les conditions limites internes, et iv) augmenter la densité de points pilotes là où les données observées sont importantes.

Le krigeage a été choisi comme interpolateur pour étendre la valeur des propriétés hydrodynamiques des points pilotes à la grille de calcul. Cette méthode d'interpolation permet une bonne estimation des propriétés hydrodynamiques entre les points pilotes Doherty et al. (2011). Étant donné que l'on a souvent que peu d'information pour établir un variogramme expérimental, le choix d'un variogramme pour le krigeage est souvent fait en fonction de la géométrie du modèle et de la distribution des points pilotes plutôt que sur un variogramme expérimental. Un variogramme exponentiel a été choisi car il est moins enclin à la création de champs de paramètres parasites entre les points pilotes, et permet donc d'établir des champs géologiquement plus vraisemblables. Le paramètre contraignant le plus l'interpolation va être la portée, elle doit être choisie comme étant environ la distance entre 2 à 3 points pilotes, ce paramètre peut en suite être adapté afin d'éviter la création de motifs circulaires lors de l'interpolation (*bull's eyes*). Une portée de 250 m a été choisie, l'effet pépité est fixé à 0.1 et le palier à 2. Le krigeage est effectué à l'aide de la librairie R GSTAT (Pebesma and Wesseling, 1998).





**Figure 7.6 :** Évolution des fonctions objectif de charges, de débit, et de rapports de mélange lors de la phase d'estimation des paramètres par l'algorithme PEST++. On notera la faible représentation des observations de débits dans la fonction objectif totale

## 7.4 Résultats de l'estimation des paramètres

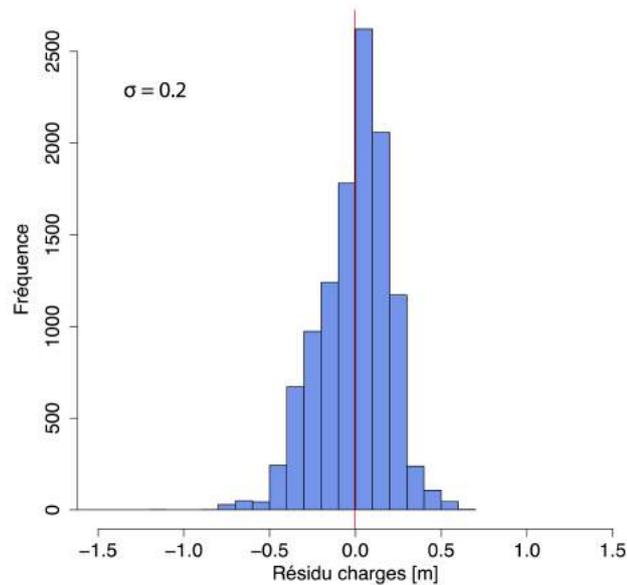
L'estimation des paramètres a été réalisée en deux étapes : dans un premier temps les paramètres ont été estimés par résolution du problème inverse sur le modèle d'écoulement seul (dénommé comme étant l'approche n°1), par la suite les paramètres ont été estimés par résolution du problème inverse sur le modèle d'écoulement et de suivi de particules (MODPATH) combiné, tel que présenté Figure 7.4 (dénommé comme étant l'approche n°2). Les résultats sont majoritairement présentés pour l'approche n°2. Cependant, la comparaison entre les résultats de l'estimation des paramètres avec l'approche n°2 et l'approche n°1 sera faite afin d'évaluer les avantages / inconvénients de l'apport des informations de transport à l'estimation des paramètres.

### 7.4.1 Performance de l'estimation algorithmique des paramètres par PEST++

Les résultats de la performance de l'estimation algorithmique des paramètres, sont ici présentés pour l'approche n°2, puisqu'ils représentent l'aboutissement de notre réflexion sur la modélisation du site d'étude, et le modèle qui permettra de réaliser des prédictions. La fonction objectif a atteint sa valeur minimale à l'itération 38 (Figure 7.6). L'estimation des paramètres a demandé 38 004 exécutions de modèle. Chaque exécution de modèle prend environ 5 minutes de temps CPU. Les calculs ont été parallélisés sur 44 processeurs portant le temps de calcul total de l'estimation des paramètres à 2 jours et 18 heures.

ID	Type	Nb. Obs	Poids	RMSE	$\Phi$ contribution
ap1	charge [m]	215	1	0.21	9.72
p23	charge [m]	193	1	0.14	3.68
p24	charge [m]	629	1	0.20	25.02
p25	charge [m]	629	1	0.12	9.57
p26	charge [m]	537	1	0.17	15.50
p27	charge [m]	537	1	0.20	21.70
p28	charge [m]	537	1	0.18	17.44
p29	charge [m]	537	1	0.20	20.63
p30	charge [m]	537	1	0.32	55.44
p32	charge [m]	628	1	0.19	21.79
p33	charge [m]	628	1	0.21	29.02
p34	charge [m]	414	1	0.15	9.89
p37	charge [m]	419	1	0.14	7.85
p38	charge [m]	419	1	0.16	11.29
p39	charge [m]	419	1	0.19	15.30
p40	charge [m]	419	1	0.19	15.83
p8	charge [m]	628	1	0.25	37.90
pf	charge [m]	593	1	0.16	14.74
ph	charge [m]	497	1	0.28	39.41
pzhm1	charge [m]	537	1	0.17	15.21
r20	charge [m]	613	1	0.20	24.69
r21	charge [m]	449	1	0.28	35.90
rck1	charge [m]	132	1	0.12	1.76
rck2	charge [m]	132	1	0.13	2.39
eau brute	débit [m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup> ]	636	0.01	12.51	9.96
barbacanes	débit [m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup> ]	705	0.01	10.88	8.34
galerie	rapport mélange [%]	1	100	2.65	7.00
r20	rapport mélange [%]	1	100	3.50	12.26
r21	rapport mélange [%]	1	100	18.81	353.94
FN/DCRT	régularisation	-	1	-	17.85
CRIV <sub>Ru</sub>	régularisation	-	1	-	17.85
C <sub>galerie</sub>	régularisation	-	1	-	17.80
C <sub>barbac</sub>	régularisation	-	1	-	17.79
Point pilote S	régularisation	-	1	-	17.89
Point pilote T	régularisation	-	1	-	17.97
C <sub>GHB_S</sub>	régularisation	-	1	-	18.12
C <sub>GHB_N</sub>	régularisation	-	1	-	18.55
CRIV <sub>Jalle</sub>	régularisation	-	1	-	17.85
$\Phi$ Total = 1014.8					
$\Phi$ Mesure = 853					
$\Phi$ Régularisation = 161.7					

**Tableau 7.2 :** Résumé de la contribution à la fonction objectif  $\Phi$  de chaque groupe d'observation, de leur poids et de leur RMSE

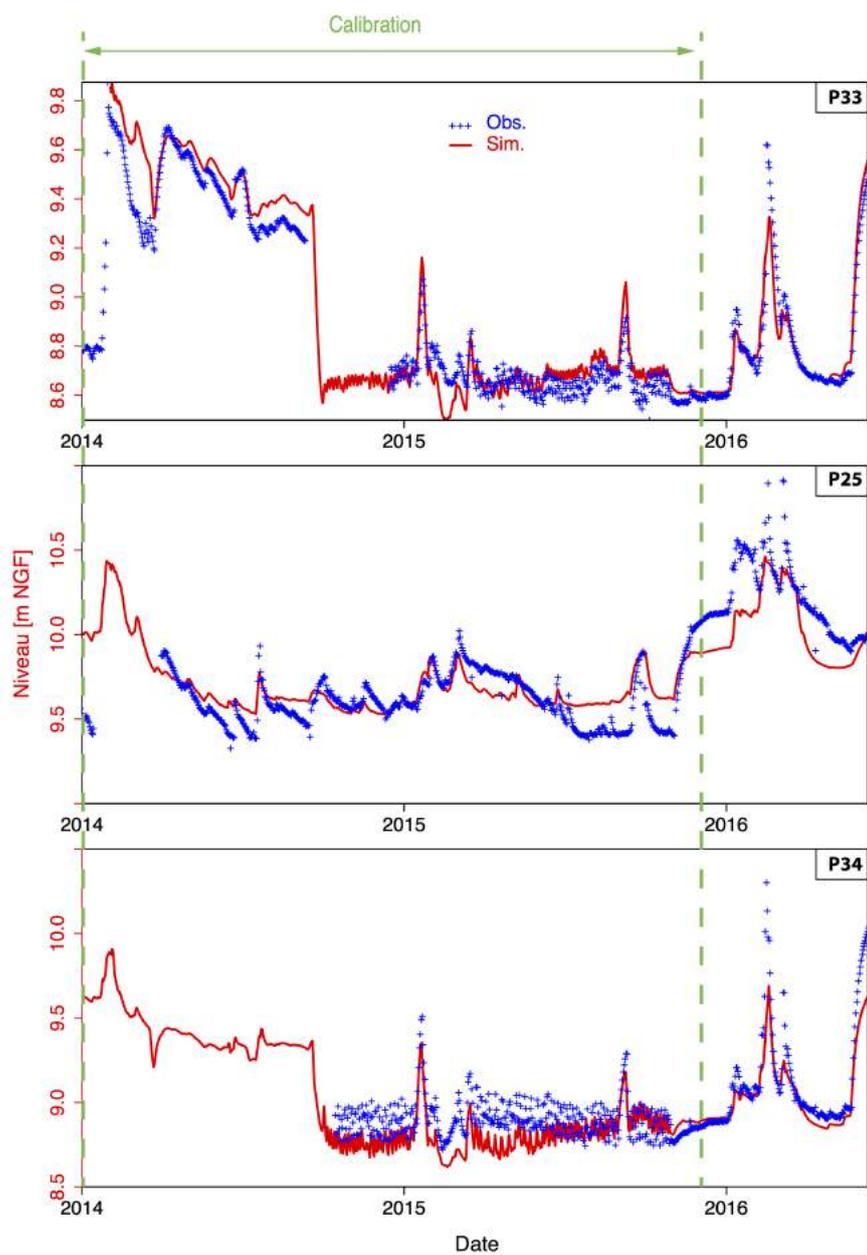


**Figure 7.7 :** Histogramme des résidus des charges (charge observée - simulée) pour le modèle n°2

La performance de l'estimation des paramètres est résumée dans le tableau 7.2. La RMSE (racine carré de la somme des résidus au carré) est de 0.19 m en moyenne pour les charges, et de  $11.7 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$  pour les débits. Les rapports de mélange sont plutôt bien simulés avec une erreur pour la galerie et R21 de 2.6 et 3.5% d'eau de rivière respectivement. Pour R21, les rapports de mélange sont un peu moins bien simulés avec une sur-estimation de 18.81% de la proportion d'eau de rivière (Tableau 7.2). La capacité du modèle à reproduire l'état du système est également évaluée au travers de la distribution des résidus entre les observations et les simulations de charges hydrauliques pour l'ensemble des points d'observation (Figure 7.7).

La distribution des résidus de charge hydraulique (Figure 7.7) ne souligne pas d'erreur importante sur la simulation des charges. La figure 7.8 représente les chroniques de charges observées et simulées pour trois points d'observation choisis comme représentatifs du système. Les dynamiques du système, et les réponses aux arrêt / reprise de pompage en fin de chronique sont correctement simulées. La période post-calibration qui peut être assimilée à une phase de validation conserve une bonne simulation des charges.

Ces représentations (Figures 7.2, 7.7 et 7.8) confirment une bonne performance de l'estimation des paramètres par l'algorithme PEST++ et une bonne simulation de l'état transitoire du système pour le modèle n°2. La simulation des charges hydrauliques, débits et rapports de mélanges à partir des paramètres estimés est satisfaisante.



**Figure 7.8** : Charges observées et simulées par le modèle n°2 pour les points d'observation P33, P25 et P35

### 7.4.2 Performance de la régularisation

L'estimation des paramètres de l'approche n°2 a été réalisée avec une valeur de facteur lagrangien (PHIMLIM dans PEST++) de pondération de la régularisation de Tikhonov de 1 (voir section 7.2.3.1). Cette valeur est faible et ne permet en théorie qu'une prise en compte faible des valeurs de régularisation (Anderson et al., 2015; Fienen et al., 2009b). Cependant les valeurs de facteur lagrangien plus élevées testées, évaluées selon les recommandations de Fienen et al. (2009b) (décrit section 7.2.3.1), ne permettent pas de satisfaire suffisamment les observations et notamment les valeurs de rapport de mélange entre les eaux de surface et les eaux souterraines. Lors de l'estimation des paramètres avec l'approche n°1, les observations de charge ont pu être correctement représentées tout en donnant un poids élevé à la fonction objectif de régularisation. La difficulté d'obtenir une forte régularisation pour l'approche n°2 peut s'expliquer par : l'obligation de créer un champ hétérogène des paramètres hydrodynamiques pour satisfaire les rapports de mélange observés, ce qui va à l'encontre d'une valeur unique de régularisation pour l'ensemble des points pilotes qui tend à homogénéiser le champ des paramètres hydrodynamiques.

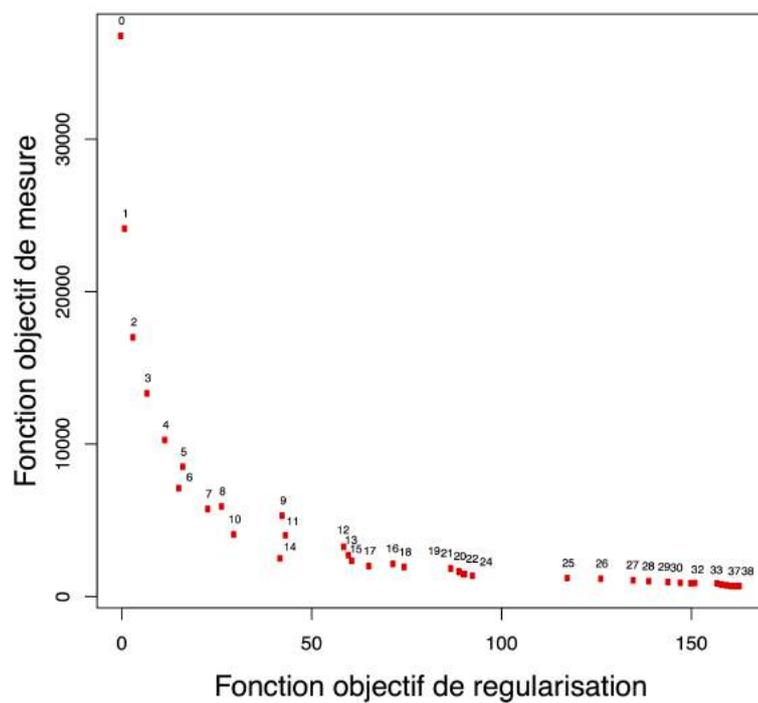
De plus lorsque l'on n'utilise pas de régularisation, les performances de l'algorithme (réduction de la valeur de la fonction objectif) sont bien moins bonnes. La régularisation, même faible, a un effet positif, de stabilisation de l'algorithme (Fienen et al., 2009b)

Le compromis entre la fonction objectif de mesure et la fonction objectif de régularisation au cours des itérations d'estimation des paramètres pour le modèle n°2 est représenté sur la Figure 7.9. On observe que la fonction objectif de régularisation n'a pas besoin d'être fortement dégradée pour améliorer la fonction objectif de mesure. Les paramètres obtenus lors de la dernière itération (38), satisfaisant au mieux les observations, peuvent être gardés tout en conservant une cohérence avec les données de régularisation.

Pour ce qui est de la régularisation mathématique TSVD, il s'est avéré au cours de la phase d'estimation des paramètres que les valeurs de seuil communément admises étaient bien trop faibles pour notre problème, une valeur comprise entre 1E-3 et 1E-2 aurait été plus justifiée. Cependant ces valeurs étant bien trop éloignées des valeurs de référence (Doherty et al., 2011; Fienen et al., 2009b), nous avons décidé de garder un seuil bas quitte à réduire l'effet de la régularisation mathématique TSVD. Cette absence de seuil marquant l'espace nul peut être expliquée par la faible corrélation entre paramètres et la bonne sensibilité de la quasi-totalité des paramètres face aux observations qui sera confirmée par l'analyse linéaire.

### 7.4.3 Comparaison des résultats avec le modèle classique de transport MT3DMS

Comme détaillé précédemment les observations de transport (rapport de mélange nappe-rivière aux ouvrages de production) ont été simulées à partir d'un mo-



**Figure 7.9 :** Le compromis entre la fonction objectif de mesure et la fonction objectif de régularisation pour chaque itération, la fonction objectif de régularisation n'a pas besoin d'être fortement dégradée pour améliorer la fonction objectif de mesure.

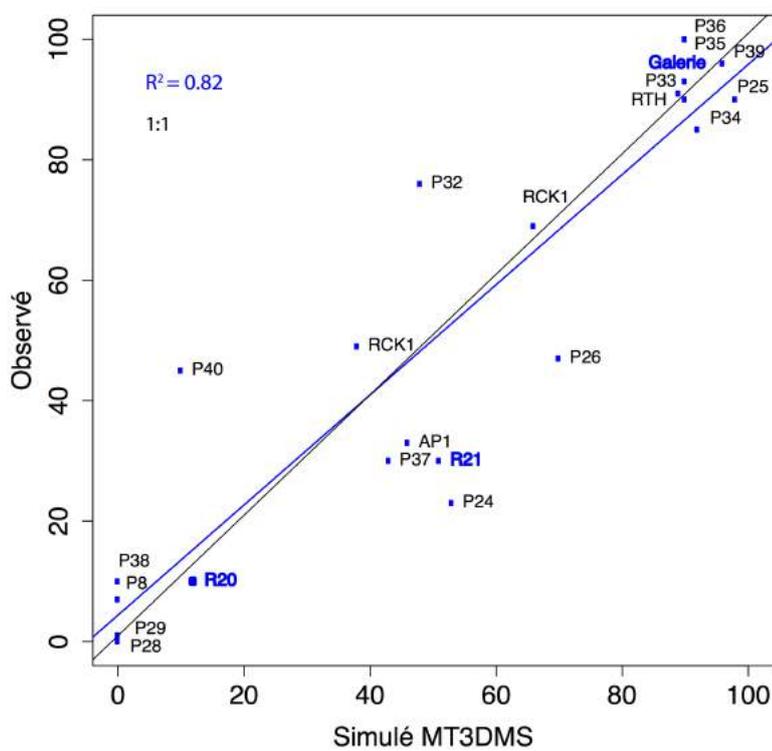
Ouvrage	observé [% eau de rivière]	Simulé MODPATH (calage)	Simulé MT3D (validation)
Galerie (Point Rth)	90	92	90
R20	10	13	12
R21	30	49	51

**Tableau 7.3 :** Validation de la simulation du transport avec le modèle équivalent

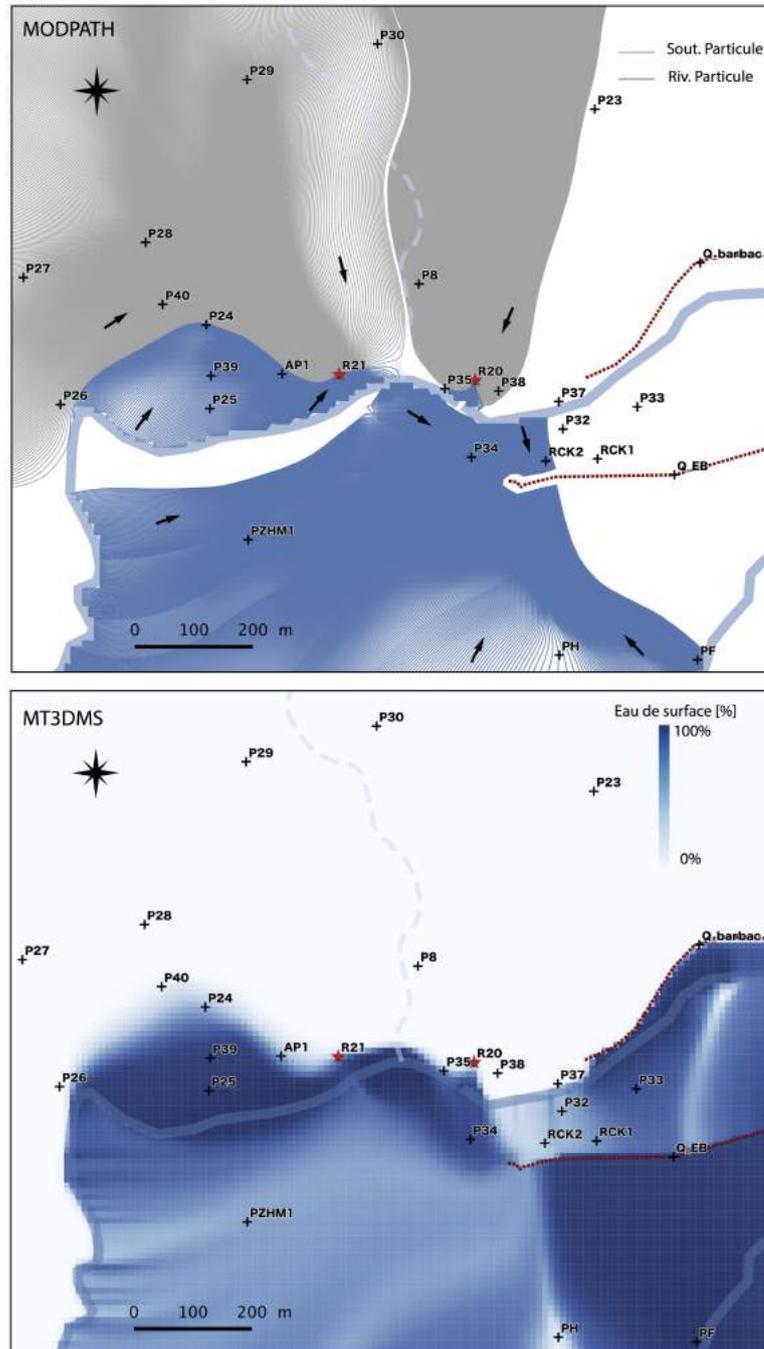
dèle équivalent de suivi de particules (Chapitre 6). Les résultats de la simulation des observations de transport obtenus à partir de l'estimation des paramètres sont maintenant confrontés au modèle classique de transport advectif-dispersif MT3DMS (Figure 7.11). Les valeurs de rapport de mélange simulées avec le modèle équivalent et le modèle classique sont comparées dans le Tableau 7.3. Les valeurs de rapport de mélange réalisées avec le modèle équivalent basé sur le suivi de particules sont cohérentes avec celles du modèle classique basé sur la résolution de l'équation d'advection-dispersion. Ce résultat vient valider l'approche du modèle équivalent développé.

L'estimation des paramètres a été réalisée vis-à-vis des observations de transport faites aux puits de production uniquement, condition nécessaire à l'utilisation du modèle équivalent (voir Chapitre 6). Cependant, avec le modèle classique d'advection dispersion MT3DMS les rapports de mélange peuvent être simulés sur l'ensemble des points d'observation. La comparaison entre valeurs simulées et observées est faite, post-calibration, sur l'ensemble des points échantillonnés à partir du modèle classique MT3DMS (Figure 7.10).

La simulation des rapports de mélange aux points d'observation est satisfaisante avec un coefficient de corrélation supérieur à 0.8. Les points dont la valeur des rapports de mélange observés et simulés diffèrent se trouvent majoritairement en bordure du "panache" d'eau de rivière (Figure 7.11). En perspective, ces simulations pourraient sans doute être améliorées en ajustant la dispersion, sur le modèle MT3DMS, pouvant être à l'origine des différences entre valeurs simulées et observées sur les points proches de la frange dispersive. L'hypothèse d'un régime d'écoulement permanent peut également être une source d'erreur. Par exemple, la valeur du rapport de mélange au point P32 peut varier fortement en fonction des saisons et du régime d'exploitation dans l'ouvrage Galerie.



**Figure 7.10 :** Rapports de mélange observés et simulés (MT3DMS) pour l'ensemble des puits échantillonnés, l'estimation des paramètres ayant été faite avec le modèle équivalent (MODPATH) sur les points Galerie, R20 et R21



**Figure 7.11 :** Simulation du transport avec le modèle équivalent de suivi de particule (MODPATH) et avec le modèle classique d'advection dispersion (MT3DMS). Les lignes de courant bleus représentent les particules interceptant la rivière Jalle, les particules blanches représentent les particules n'interceptant pas la Jalle

#### 7.4.4 Valeurs des paramètres estimés

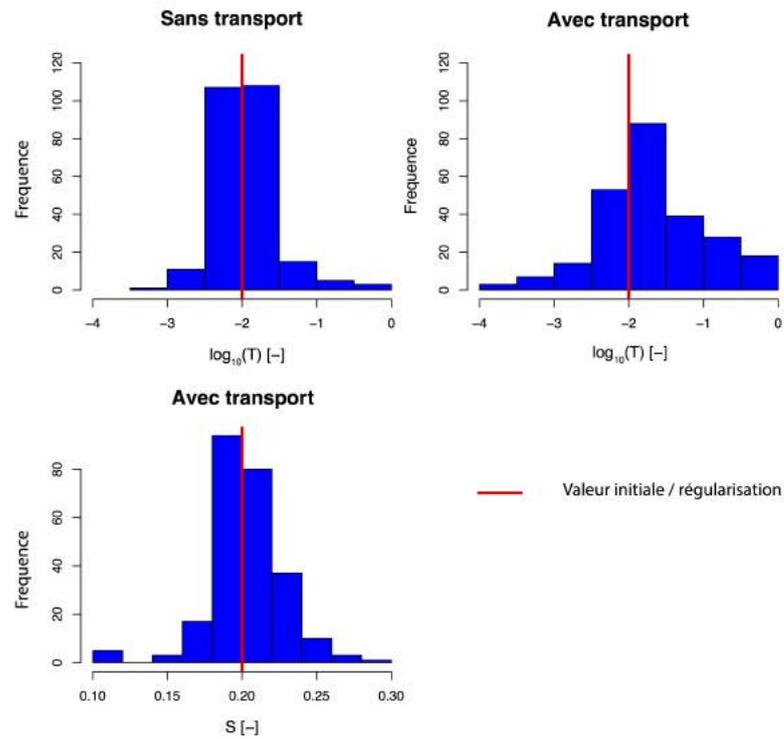
Les paramètres estimés par résolution du problème inverse de l'approche n°2 sont présentés dans cette section et comparés à ceux obtenus avec l'approche n°1 afin d'évaluer la prise en compte des informations de rapport de mélanges sur l'estimation des paramètres.

Les cartes de transmissivité résultent de l'estimation des paramètres par l'approche n°1 et 2 sont comparées (Figure 7.13). Le champ de transmissivité obtenu à partir du modèle prenant en compte les observations de transport est plus contrasté que lorsque seules les observations de charges et de débits sont prises en compte. Cela peut s'expliquer par la régularisation sur les valeurs préférées de transmissivité qui est moins forte sur l'approche n°2 que n°1. Mais également, et les deux choses sont liées, par les couloirs de forte transmissivité qui doivent être formés afin de permettre l'apport d'eau souterraine aux ouvrages de production R20 et R21 pour satisfaire les rapports de mélange observés. Ces zones sont à mettre en relation avec les zones d'anomalie géophysique mises en avant par les prospections électro-magnétique et électrique désignant des zones préférentielles de fracture (cf Chapitre 4). De plus, la direction de ces couloirs de forte transmissivité, notamment à l'ouest du R21, peut être reliée avec la direction de la faille de Bordeaux et des potentielles fractures associées. Une zone de plus faible transmissivité est également présente le long du cours d'eau temporaire entre les puits R20 et R21.

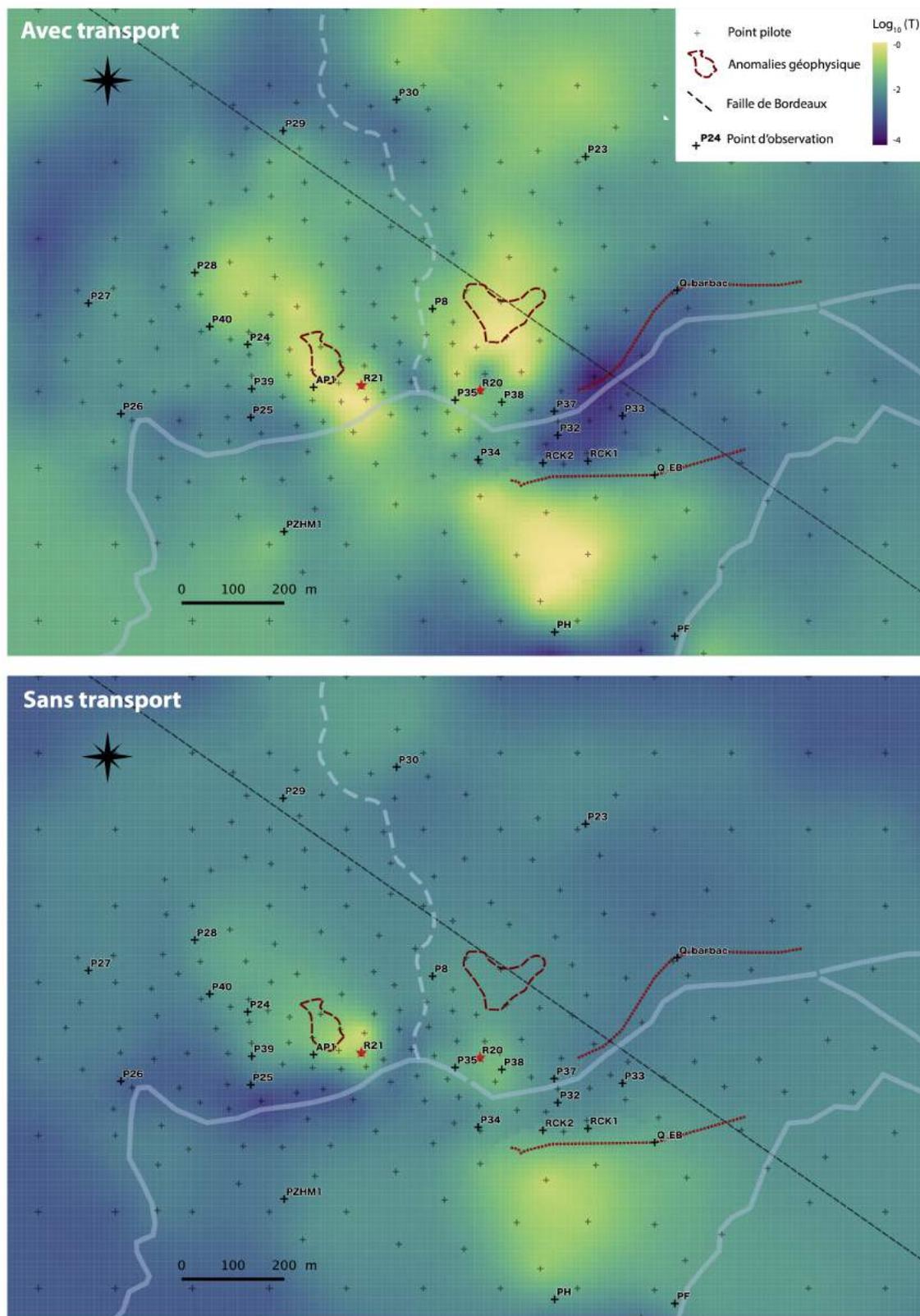
Parmi les différentes prospections de terrain visant à caractériser les écoulements, certaines sont ici à relier avec l'estimation des paramètres spatialisés et viennent confirmer une partie du champ de transmissivité obtenu. Ces différentes zones ne sont cependant pas ressorties de l'estimation des paramètres basée sur les observations de charge et de débit seuls (Figure 7.13). Ces résultats soulignent l'intérêt d'incorporer divers types d'observations et notamment de transport pour contraindre l'estimation des paramètres d'un modèle hydrogéologique d'échange nappe-rivière (Anderman and Hill, 1997; Fleckenstein et al., 2010; Hunt et al., 2006).

La distribution des valeurs de transmissivité et de porosité de drainage obtenue par l'estimation des paramètres montre une distribution moins étendue pour l'approche n°1 que pour la n°2 (Figure 7.12). La distribution des valeurs de porosité de drainage ne sont pas représentées pour le modèle n°1 puisqu'elles sont identiques en chaque point pilote et égales à la valeur initiale / régularisation de 0.2. La distribution plus réduite pour l'approche n°1 que pour la n°2 s'explique pour les mêmes raisons que celles énoncées plus haut, c'est à dire la difficulté de régulariser autant sur la valeur préférée pour l'approche n°2 que sur le n°1, expliquée par l'obligation de créer des contrastes de transmissivité pour reproduire correctement les rapports de mélange observés aux ouvrages de production.

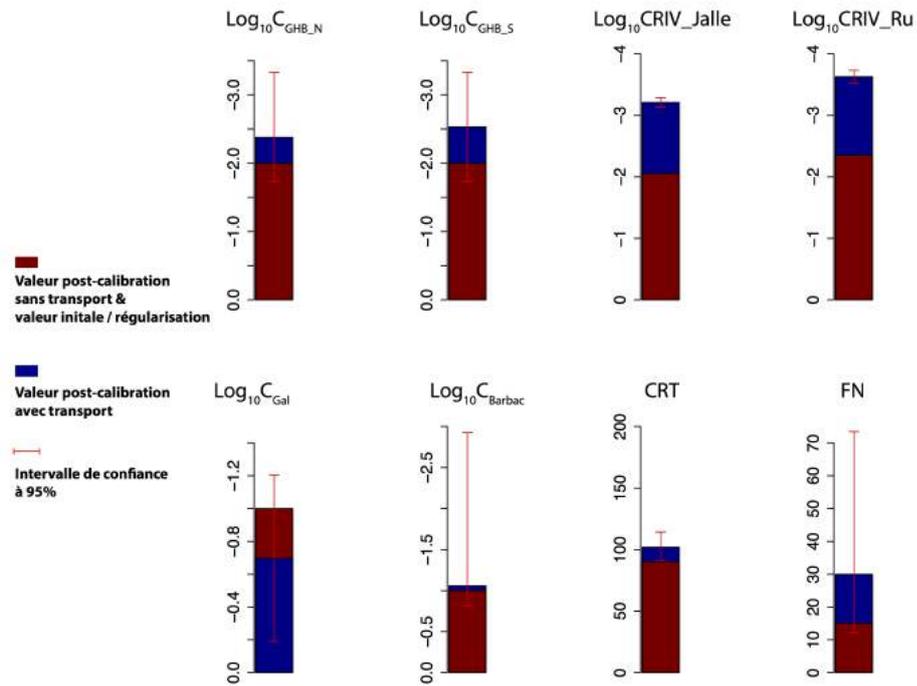
Les paramètres non spatialisés obtenus à partir de l'approche n°1 et 2 sont sensiblement différents (Figure 7.14). Les paramètres obtenus à partir de l'approche n°1 sont équivalents aux valeurs initiales et de régularisation. Cependant pour



**Figure 7.12** : Distribution des paramètres hydrodynamiques estimés aux points pilotes sans (modèle n°1) et avec (modèle n°2) prise en compte du transport. La distribution de  $S$  sans transport n'est pas représentée car le champ est homogène



**Figure 7.13 :** Comparaison des champs de transmissivité obtenus par estimation des paramètres avec les informations de transport et sans les informations de transport.



**Figure 7.14 :** Paramètres estimés, avec le modèle sans transport (approche n°1) et avec transport (approche n°2). L'intervalle à 95% sur les paramètres estimés avec transport est déduit de l'analyse linéaire

l'approche n°2, les valeurs des paramètres se sont éloignées des valeurs de régularisation afin de satisfaire les observations de rapport de mélange au détriment des contraintes de régularisation.

L'intervalle de confiance à 95% des paramètres obtenus à partir du modèle n°2 est calculé par analyse à partir linéaire de la matrice Jacobienne (Équation 7.4). Ce résultat est obtenu à partir de la suite PEST++. Les intervalles de confiance sont largement étendus pour le paramètre  $FN$ , étendus pour les conductances des conditions limites  $C_{GHB\_S}$  et  $C_{GHB\_N}$  et les conductances des drains  $C_{Gal}$  et  $C_{Barbac}$ , faibles pour les autres paramètres. Ces écarts peuvent en partie être expliqués par l'analyse des sensibilités (sensibilité composite), et de la corrélation entre paramètres (coefficient de corrélation) conduite dans la section suivante. Ces deux outils statistiques permettent de définir le caractère identifiable d'un paramètre au vu des observations de l'état du système, et d'expliquer a posteriori les incertitudes paramétriques à l'origine d'éventuelles incertitudes prédictives (Hill and Tiedeman, 2006).

## 7.5 Quantification des incertitudes

### 7.5.1 Analyse linéaire

D'après Doherty et al. (2011), les incertitudes proviennent de plusieurs sources : les incertitudes sur les mesures (charges, débits, *etc*) ; sur les paramètres et les erreurs structurelles du modèle. Des valeurs erronées de paramètre peuvent alors venir compenser ces sources d'incertitudes. L'analyse de l'incertitude est nécessaire afin de faire face aux risques associés aux différentes stratégies de gestion élaborées à partir d'un modèle (Delottier et al., 2016).

Les méthodes d'analyse linéaire sont basées sur l'analyse de la matrice Jacobienne (Équation 7.4). Elles sont généralement pratiquées pour obtenir un écart-type, une variance ou un intervalle de confiance à 95% sur les paramètres où une variable prédite (Anderson et al., 2015). Elle permet également d'obtenir une idée de la corrélation entre les paramètres ainsi que la sensibilité de chaque paramètre (Hill and Tiedeman, 2006). Ce type d'analyse est rapide à exécuter et permet d'établir un diagnostic efficace des résultats de l'estimation des paramètres (Hill et al., 2016). L'intervalle de confiance des paramètres obtenus (Figure 7.14), la sensibilité composite, ainsi que la matrice de corrélation entre paramètres sont ici utilisés pour évaluer le degré de confiance sur les valeurs des paramètres estimés. Les résultats de l'analyse linéaire présentés sont réalisés avec la suite PEST++ (Welter et al., 2012) ainsi que le code python développé par White et al. (2016).

#### 7.5.1.1 Sensibilité composite

La sensibilité du paramètre  $i$  est définie par (Doherty, 2010) :

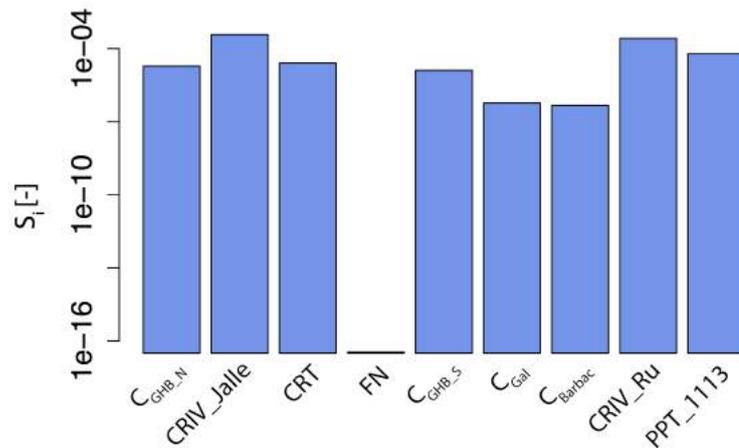
$$s_i = ((\mathbf{J}^t \mathbf{Q} \mathbf{J})_{ii}^{1/2} / m) \times |\log_{10}(i)| \quad (7.24)$$

où  $\mathbf{J}$  est la matrice Jacobienne,  $\mathbf{Q}$  est la matrice contenant le carré des facteurs de pondération des observations,  $m$  est le nombre d'observations. Afin d'obtenir des valeurs de sensibilité comparables entre plusieurs paramètres d'unités et de magnitudes différentes, cette sensibilité est multipliée par la valeur absolue du logarithme du paramètre  $i$ .

L'ensemble des paramètres présente des sensibilités ayant le même ordre de grandeur, hormis le paramètre  $FN$  qui présente une faible sensibilité. Le paramètre  $FN$  est une valeur seuil représentant la capacité d'infiltration du sol, dans la fonction de production de Ledoux (Ledoux et al., 1984) (cf Section 5.4.2.3).

#### 7.5.1.2 Coefficient de corrélation des paramètres

La calcul du coefficient de corrélation en parallèle de la sensibilité composite permet une étude efficace du caractère identifiable d'un paramètre au vu des observations (Hill and Tiedeman, 2006). Le coefficient de corrélation entre deux



**Figure 7.15** : Sensibilité composite  $s_i$  (Équation 7.24) des paramètres non spatialisés.  $PP\_1113$  représente l'ensemble des points pilotes liés (Figure 7.5). L'axe des ordonnées est à l'échelle logarithmique

	$PP\_1113$	$C_{GHB\_S}$	$CRIV\_Jalle$	$C_{GHB\_N}$	$FN$	$C_{RIV\_Ru}$	$CRT$	$C_{galerie}$	$C_{barbacanes}$
$PP\_1113$	1.00	0.35	0.28	0.77	0.00	0.16	0.05	0.00	0.09
$C_{GHB\_S}$		1.00	0.35	0.31	0.00	0.55	0.21	0.01	0.01
$CRIV\_Jalle$			1.00	0.22	0.00	0.12	0.27	0.05	0.07
$C_{GHB\_N}$				1.00	0.00	0.09	0.12	0.02	0.02
$FN$					1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
$CRIV\_Ru$						1.00	0.08	0.05	0.04
$CRT$							1.00	0.00	0.03
$C_{galerie}$								1.00	0.02
$C_{barbacanes}$									1.00

**Figure 7.16** : Valeur absolue du coefficient de corrélation post-calibration des paramètres non spatialisés.  $PP\_1113$  représente l'ensemble des points pilotes liés (Figure 7.5). D'après cette analyse, les coefficients de corrélation sont relativement faibles ( $< 0.77$ ).

paramètres est obtenu par :

$$cc_{jk} = \frac{Cov(b)_{jk}}{Var(b)_{jj} \times Var(b)_{kk}} \quad (7.25)$$

où,  $Cov(b)_{jk}$  est la covariance entre deux paramètres et  $Var(b)_{jj}$  et  $Var(b)_{kk}$  sont les variances de chacun des deux paramètres. Les valeurs peuvent s'étaler de -1 à 1, où -1 correspond à une anti-corrélation totale et 1 une corrélation totale, une valeur de 0 indique aucune corrélation.

Les coefficients de corrélation (Figure 7.16) obtenus font état de faibles corrélations. Seul le coefficient de corrélation entre la conductance de la condition limite nord ( $C_{GHB\_N}$ ) et la zone de points pilotes liée présente une certaine corrélation (supérieure à la valeur de référence de 0.75 (Frontier et al., 2001)). Il est admis les paramètres sont fortement corrélés et ainsi difficile à estimer pour des coefficients de corrélation supérieurs à 0.95 (Hill and Tiedeman, 2006).

L'analyse linéaire réalisée sur les paramètres non spatialisés, montre qu'il n'y a

pas de forte corrélation entre ces paramètres, ni de paramètres insensibles en dehors du paramètre  $FN$ . Ainsi d'après ces résultats, hormis  $FN$ , les paramètres peuvent potentiellement être bien identifiés à partir des observations car ils ne présentent ni de trop forte corrélation ni d'insensibilités (Doherty, 2015; Hill and Tiedeman, 2006). Une analyse plus poussée de l'incertitude paramétrique est réalisée à partir de la méthode non-linéaire du Null-Space Monte Carlo (NSMC).

## 7.5.2 Méthode du Null-Space Monte Carlo (NSMC)

L'analyse d'incertitude paramétrique, amorcée par l'analyse linéaire, est approfondie sur le modèle n°2 dans le but d'évaluer l'efficacité de la phase d'estimation des paramètres. L'incertitude prédictive est également menée dans le but de quantifier le niveau de confiance des prédictions du modèle.

L'estimation de l'incertitude peut être linéaire ou non-linéaire. Les méthodes linéaires sont généralement peu coûteuses en temps de calcul car basées sur l'analyse de la matrice jacobienne, calculée une seule fois et comprenant la sensibilité des paramètres aux sorties du modèle (Anderson et al., 2015). Cependant les valeurs associées aux résultats de l'analyse linéaire sont moins fiables que celles obtenues par analyse non-linéaire (Doherty et al., 2011). Les méthodes non-linéaires demandent cependant plus de temps de calcul et une plus grande implication de l'utilisateur dans sa pratique. Elles sont dites non-linéaires, parce qu'elles ne supposent pas une relation linéaire entre les entrées du modèle et les prédictions (Anderson et al., 2015). Deux méthodes d'analyse non-linéaire sont implémentées dans la suite PEST++, la méthode par maximisation/minimisation et le Null-Space Monte Carlo (NSMC). La méthode du NSMC, plus robuste que la méthode par maximisation/minimisation (Doherty et al., 2011), est utilisée ci-après pour approfondir l'analyse d'incertitude paramétrique et prédictive.

### 7.5.2.1 Principe de la méthode NSMC

De nombreuses méthodes basées sur des tirages de Monte Carlo sont utilisées pour l'analyse d'incertitude des modèles hydrogéologiques (Doherty, 2015). Pour la méthode Monte Carlo une distribution est tirée pour chaque paramètre, basée sur leur distribution *a priori*, et chaque jeu de paramètre obtenu représente une solution. Malheureusement, cette méthode demande généralement des milliers voir des millions d'exécution de modèle (Zheng et al., 2002) ce qui limite leur utilisation pour les modèles fortement paramétrisés (Tonkin and Doherty, 2009). C'est pour les mêmes raisons que l'approche Bayésienne, tel que les chaînes de Markov Monte Carlo (MCMC) (Oliver et al., 2008), est souvent difficilement applicable pour ce type de modèle hydrogéologique.

La méthode du NSMC est proposée comme alternative par Tonkin and Doherty (2009). L'espace des paramètres peut être décomposé en deux domaines : l'espace des solutions et l'espace nul. Si le modèle est linéaire, les variations des paramètres (ou combinaisons linéaires de paramètres) dans l'espace nul n'ont pas de conséquences sur les observations intégrées dans la fonction objectif. La méthode

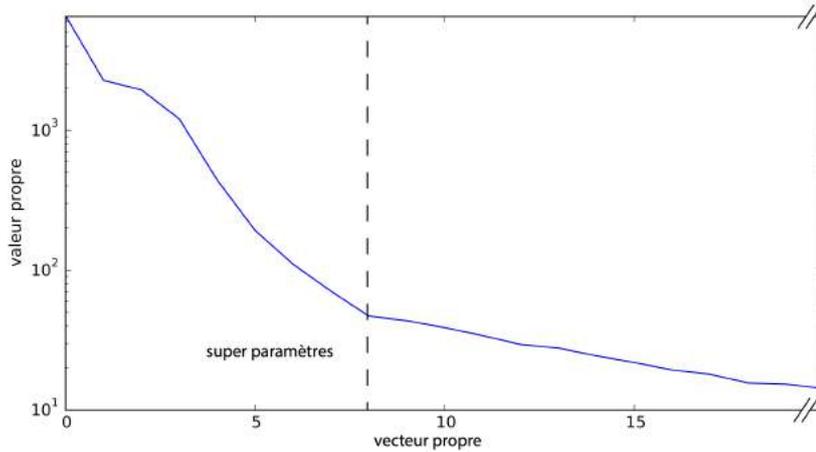
NSMC est une technique d'échantillonnage dans l'espace nul des paramètres qui permet de générer des paramètres reproduisant correctement les observations disponibles.

Keating et al. (2010) montrent, à travers une comparaison entre analyse bayésienne et NSMC sur un modèle hydrogéologique réel, que les résultats obtenus par NSMC sont proches de ceux obtenus par analyse bayésienne. Cependant, comparé à d'autres méthodes comme l'estimation des paramètres à partir de plusieurs jeux de paramètres de départ (*multiple starting point method*), le NSMC semble minimiser les incertitudes prédictives (Yoon et al., 2013). Glenz (2013) démontre également, à travers une étude théorique sur un modèle conceptuel, que dans un contexte non-linéaire la méthode NSMC peut effectivement sous-estimer les incertitudes. La méthode NSMC a cependant montré son efficacité sur des problématiques pratiques (Sepúlveda and Doherty, 2015; Tavakoli et al., 2013), et reste un bon compromis entre efficacité et temps de calcul (Anderson et al., 2015). Les étapes de réalisation de la technique NSMC, telles qu'utilisées dans cette étude sont Tonkin and Doherty (2009) :

1. l'estimation des paramètres réalisée telle que présentée dans les sections précédentes avec une régularisation hybride Tikhonov-TSVD ;
2. le calcul de la matrice Jacobienne  $\mathbf{J}$  à partir des paramètres estimées ;
3. réaliser la décomposition en valeurs propres de la matrice  $\mathbf{J}^t \mathbf{Q} \mathbf{J}$  afin d'obtenir  $\mathbf{V}_1$  et  $\mathbf{V}_2$  (Section 7.17) ;
4. déterminer les dimensions de l'espace de calibration en fonction d'un seuil de troncature ;
5. génération stochastique de nombreux jeux de paramètres basé sur les paramètres préalablement estimés et leurs intervalles de confiance a priori ;
6. calculer  $\mathbf{V}_2 \mathbf{V}_2^t$  et projeter la différence entre les paramètres stochastiques et les paramètres estimés à l'intérieur de l'espace nul de calibration ;
7. ajouter cette différence aux valeurs des paramètres calibrés ;
8. re-calibrer les jeux de paramètres s'écartant de la fonction objectif définie comme acceptable.

### 7.5.2.2 Génération et projection dans l'espace nul de jeux de paramètres stochastiques

L'étape d'estimation des paramètres a permis d'obtenir un jeu de paramètres calibrés  $\mathbf{b}$ , ce qui constitue la première étape du NSMC. Un ensemble de jeux de paramètres est ensuite généré aléatoirement suivant une distribution (normale dans notre cas, car les paramètres sont log-transformés). La moyenne utilisée pour générer la distribution correspond à la valeur estimée et l'écart type est déduit à partir des bornes inférieures et supérieures *a priori* de chaque paramètre ( $\sigma =$



**Figure 7.17** : Détermination du nombre de "super paramètres" basé sur la décomposition en valeurs propres (SVD) de la matrice  $\mathbf{J}^t \mathbf{Q} \mathbf{J}$  après l'estimation des paramètres du modèle.

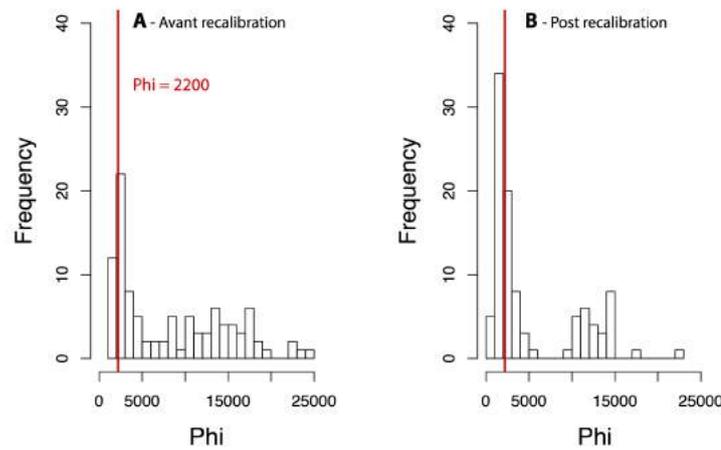
$(v_{max} - v_{min})/4$  avec  $v_{max}$  et  $v_{min}$  les valeurs maximales et minimales du paramètre après transformation logarithmique). Le jeu de paramètres obtenu doit ensuite être projeté dans l'espace nul de calibration. Pour cela la limite entre l'espace des solutions et l'espace nul doit être définie. L'obtention des vecteurs propres pour chaque paramètre par décomposition de la matrice de sensibilité  $\mathbf{J}^t \mathbf{Q} \mathbf{J}$  permet cela (Équation 7.2.3.2). Le vecteur propre  $\mathbf{V}$  peut être subdivisé en deux groupes  $\mathbf{V}_1$  et  $\mathbf{V}_2$ , où le premier comporte les vecteurs propres correspondant aux valeurs propres supérieures à un certain seuil de troncature et le deuxième comporte les vecteurs propres restant définissant l'espace nul. Le seuil de troncature a été établi par représentation graphique des valeurs propres (Figure 7.17), un nombre de 8 "super paramètres" correspondant au vecteur propre  $\mathbf{V}_1$  a été défini.

A partir de cela, la différence entre les jeux de paramètres générés stochastiquement et les valeurs estimées des paramètres peuvent être projetés dans l'espace nul de calibration (Tonkin and Doherty, 2009) :

$$(\mathbf{b} - \mathbf{b}_{st})' = \mathbf{V}_2 \mathbf{V}_2^t (\mathbf{b} - \mathbf{b}_{st}) \quad (7.26)$$

où  $\mathbf{b}_{st}$  représente les paramètres générés stochastiquement,  $(\mathbf{b} - \mathbf{b}_{st})'$  est la projection dans l'espace nul de la différence entre paramètres générés et estimés,  $(\mathbf{b} - \mathbf{b}_{st})$  représente le vecteur de la différence entre paramètres générés et estimés avant projection,  $\mathbf{V}_2 \mathbf{V}_2^t$  est la matrice contenant les vecteurs couvrant l'espace nul. Une fois calculé,  $(\mathbf{b} - \mathbf{b}_{st})'$  peut être ajouté aux paramètres estimés pour produire un nouveau jeu de paramètre. L'ensemble de cette étape a été réalisée à l'aide du module Python PyEMU développé par White et al. (2016) disponible sur le dépôt GitHub : <https://github.com/jtwhite79/pyemu>. Ce module permet d'effectuer les étapes précédemment décrites pour lire et écrire les fichiers d'entrée compatibles avec PEST++.

Un ensemble de 100 jeux de paramètres a été généré et projeté dans l'espace nul.



**Figure 7.18** : Histogramme de la répartition de la fonction objectif ( $\Phi$ ) pour les jeux de paramètres projetés dans l'espace null de calibration A) avant et B) après re-estimation de jeu de paramètres

La fonction objectif  $\Phi$  (equation 7.8) a été calculée pour chaque jeu de paramètre projeté (figure 7.18). Les jeux de paramètres jugés comme ne calibrant pas suffisamment le modèle sont alors re-calibrés.

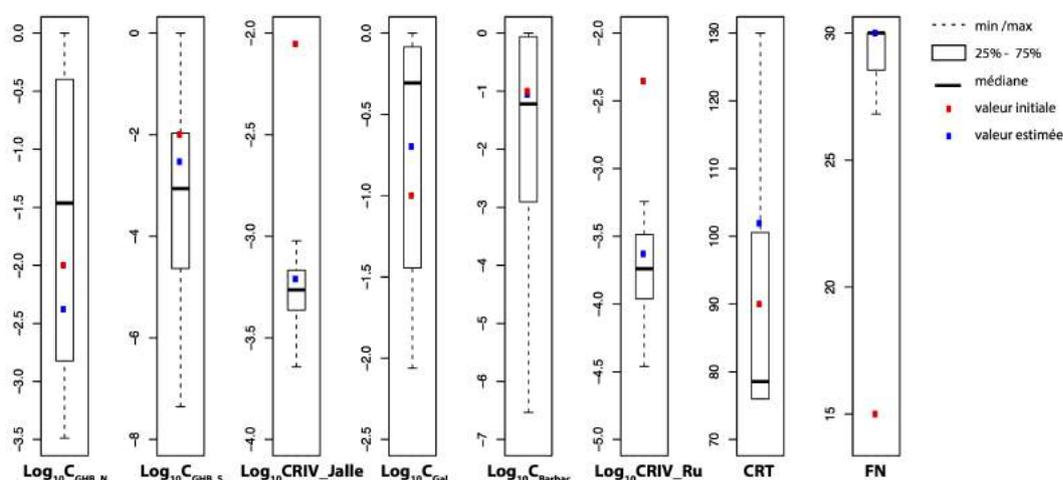
### 7.5.2.3 Re-estimation des jeux de paramètres projetés

Seuls les jeux de paramètres dont la fonction objectif  $\Phi$  associée dépasse 2200 sont re-calibrés. La valeur 2200 de fonction objectif cible a été adoptée comme permettant de maintenir un modèle suffisamment bien calibré, sur la base d'un respect des charges et des rapports de mélanges simulés. 78 jeux de paramètres sont ainsi re-estimés (Figure 7.18). Ces 78 jeux de paramètres sont re-estimés avec l'algorithme PEST++ en fixant le nombre maximal d'itérations à 2. Un nombre supérieur d'itérations permettrait d'obtenir plus de jeux de paramètres calibrant le modèle mais serait trop coûteux en temps de calcul. Après cette phase de re-estimation des jeux de paramètres, 47 sont conservés comme étant vraisemblables et simulant correctement les données observées (Figure 7.18).

## 7.5.3 Résultats de l'estimation des incertitudes par la méthode NSMC

### 7.5.3.1 Incertitudes paramétriques

La méthode NSMC permet d'obtenir plusieurs jeux de paramètres réalistes (car le tirage est basé sur la distribution a priori des paramètres) et calibrant correctement le modèle (car on ne retient que les jeux de paramètres qui conduisent à un ajustement acceptable avec les observations). La distribution obtenue pour chacun des paramètres permet l'estimation de l'incertitude paramétrique. La répartition de chaque paramètre non spatialisé est présentée (Figure 7.19).



**Figure 7.19 :** Diagramme en boîte de la répartition obtenue de chaque paramètre par la méthode NSMC.  $C_{GHB_N}$  et  $C_{GHB_S}$  sont les conductance des conditions limites nord et sud,  $CRIV\_Jalle$  et  $CRIV\_Ru$  sont les coefficients rivière des conditions limites rivière de la Jalle et du ruisseau Ste Christine,  $C_{galerie}$  et  $C_{Barbacanes}$  sont les conductances des drains (Galerie de Gamarde et Barbacanes),  $CRT$  la capacité au champ moyenne et  $FN$  la capacité d'infiltration du sol sont les paramètres de la fonction de production de Ledoux (Ledoux et al., 1984).

Certains paramètres se démarquent par leur incertitude : la conductance des conditions limites nord et sud  $C_{GHB_N}$  et  $C_{GHB_S}$  ainsi que les conductances des drains  $C_{galerie}$  et  $C_{Barbacanes}$ . Les autres paramètres montrent des incertitudes plus réduites inférieures à un ordre de grandeur. Ce résultat est cohérent avec le résultat de l'intervalle de confiance par l'analyse linéaire. Les incertitudes sur les conditions limites nord et sud  $C_{GHB_N}$  et  $C_{GHB_S}$  peuvent être expliquées par l'effet de la zone de points pilotes liés qui sépare la zone d'intérêt du modèle des conditions limites. Cette zone de points pilotes liés vient limiter l'influence des conditions limites sur les simulations du modèle. Cette effet a été recherché lors de la construction du modèle de part notre faible connaissance sur les conditions limites (cf Chapitre 4).

Les fortes incertitudes sur les conductances des drains  $C_{galerie}$  et  $C_{Barbacanes}$ , peut s'expliquer par la représentation limitée des débits dans la fonction objectif. En effet, la fonction objectif que l'algorithme PEST++ cherche à diminuer est hybride, c'est à dire qu'elle contient plusieurs types de données, aux unités différentes et variant sur des ordres de grandeurs différents. Les poids associés aux observations (Section 7.3.2.2) ont été choisis pour respecter un bon équilibre entre les différentes observations dans la fonction objectif. Ce choix a permis une bonne simulation des différents type d'observation lors de l'estimation des paramètres (Section 7.4.1). Cependant lors de la re-estimation des jeux de paramètres projetés, une large étendue de valeur de conductance des drains  $C_{galerie}$  et  $C_{Barbacanes}$  ont permis de maintenir le modèle "calibré" ( $\Phi < 2200$ ), tout en simulant des débits fortement éloignés des observations. Cela s'explique par une trop faible

représentativité des débits dans la fonction objectif totale (on peut l’observer Figure 7.6), pour l’étape de ré-estimation des paramètres issus du NSMC.

De plus, certains paramètres bien que présentant une incertitude faible s’écartent de leur valeur initiale et de régularisation, notamment  $CRIV\_Jalle$  et  $CRIV\_Ru$ . Les valeurs initiales et de régularisation de ces deux paramètres ont été définies à partir de l’approche développée par (Cousquer et al., 2017). L’écart par rapport à la valeur initiale peut s’expliquer par :

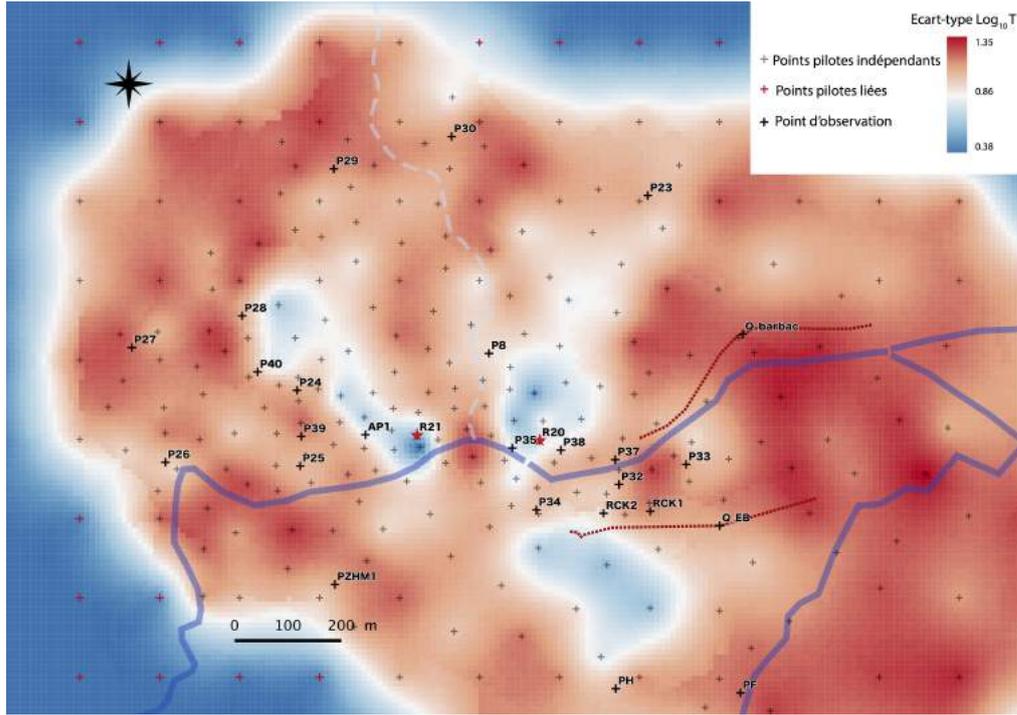
- une incertitude sur les paramètres utilisés pour le calcul de  $CRIV$  ;
- une valeur unique de  $CRIV$  pour l’ensemble de la condition limite rivière, alors que les propriétés hydrodynamiques de l’interface nappe-rivière évoluent dans le temps et l’espace (Irvine et al., 2012; Sophocleous, 2002) ;
- l’erreur structurelle engendrée par la taille des mailles trop grandes pour prendre en compte l’ensemble des flux divergents / convergents à proximité de la rivière, qui peut être compensée par un ajustement de la valeur de  $CRIV$  (Cousquer et al., 2017; Mehl and Hill, 2010).

L’incertitude sur les valeurs de transmissivité, spatialisées au travers de points pilotes, peut être représentée par l’écart-type du  $Log_{10}T$  des valeurs de transmissivité aux points pilotes obtenu par NSMC (Glenz, 2013; Woodward et al., 2016). Cette carte (Figure 7.20) est obtenue par krigeage des valeurs d’écart-type de  $Log_{10}T$  aux points pilotes, basé sur le même variogramme que pour l’estimation des paramètres.

Plusieurs zones où l’incertitude sur le  $Log_{10}T$  est faible apparaissent : la zone où les points pilotes sont liés et les zones proches des ouvrages de production. L’écart type est plus élevé dans le reste du domaine. Les zones proches des ouvrages présentant de faibles écarts-types correspondent à des zones de fortes transmissivités obtenues lors de l’estimation des paramètres. Ces zones de fortes transmissivités permettent de satisfaire les rapports de mélange observés aux ouvrages de productions. L’apport d’observation de transport, tel que réalisé ici avec les rapport de mélange, permet de réduire l’incertitude sur le champ de transmissivité aux abords des points d’observation.

### 7.5.3.2 Incertitudes prédictives

Les incertitudes prédictives sont réalisées sur les sorties d’intérêts du modèle vis-à-vis de la qualité de l’eau aux ouvrages de production : la recharge, les volumes échangés de la rivière vers la nappe et les rapports de mélanges simulés aux ouvrages de productions. Ces incertitudes sont représentées sous forme de diagrammes contenant les prédictions pour chaque jeux de paramètres obtenus par NSMC (Figure 7.21 et Figure 7.22). Les incertitudes prédictives sur la recharge, sont représentées par la répartition de la lame d’eau de recharge sur la période de calibration. De même pour les incertitudes prédictives sur les volumes nappe-rivière échangés. Pour les volumes nappe-rivière échangés seule la section



**Figure 7.20** : Interpolation de l'écart-type de  $\text{Log}_{10}T$  aux points pilotes, des différents jeux de paramètres obtenue par NSMC

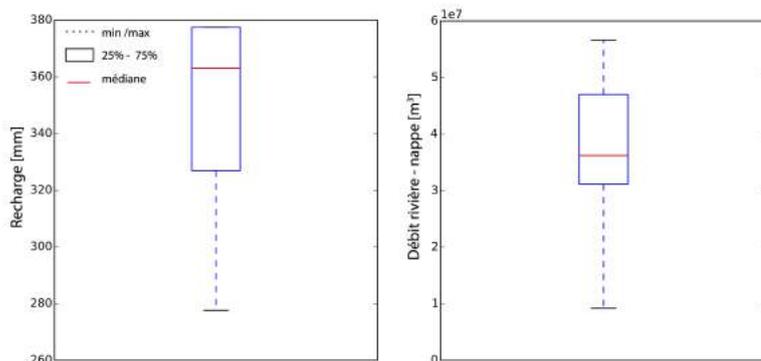
de rivière allant de l'amont du modèle jusqu'à la diffuence de la Jalle à l'extrémité des barbacanes est prise en compte (voir Figure 7.20). Seule cette section est réellement d'intérêt pour les problématiques de gestion du champ captant de Thil-Gamarde.

L'incertitude sur la prédiction de la recharge est acceptable (Figure 7.21). L'incertitude sur les débits échangés de la rivière à l'aquifère s'étale sur plusieurs ordres de grandeur. Les volumes échangés entre la nappe et la rivière sont contrôlés par l'équation (rappel des débits échangés pour une condition rivière de type Cauchy) :

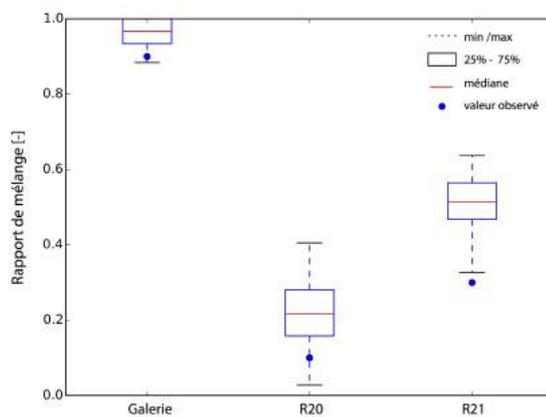
$$Q = CRIV\_Jalle \times (H_{riv} - H_{aq}) \quad (7.27)$$

où  $Q$  [ $L^3T^{-1}$ ] est le débit de la rivière à l'aquifère,  $H_{riv}$  [L] est le niveau d'eau en rivière,  $H_{aq}$  [L] est la charge hydraulique au centre de la cellule où la condition de Cauchy est appliquée,  $CRIV\_Jalle$  [ $L^2T^{-1}$ ] est le terme conductance (coefficient rivière).

L'incertitude sur le paramètre  $CRIV\_Jalle$  semble faible d'après les résultats de l'analyse linéaire et NSMC.  $H_{riv}$  est une entrée du modèle, de ce fait les variations de débits des différents modèles NSMC est à imputer à  $H_{aq}$  et donc au gradient  $H_{riv} - H_{aq}$  qui contrôle tout autant le débit échangé que  $CRIV$ .  $H_{riv} - H_{aq}$  est susceptible d'évoluer dans les différents modèles NSMC à la faveur du champ de transmissivité (Figure 7.20), mais également des débits des drains dont nous venons de voir qu'ils varient fortement selon les tirages.



**Figure 7.21 :** Distribution A) de la lame d'eau de recharge et B) des volumes échangés rivière - nappe obtenus par NSMC sur la période de calibration



**Figure 7.22 :** Distribution des rapports de mélanges simulés aux ouvrages de productions obtenue par NSMC

L'incertitude sur les rapports de mélange est faible, cependant pour l'ensemble des ouvrages le modèle tend à sur-estimer la proportion d'eau de rivière. Les travaux de terrain décrits Chapitre 4 ont montré une structure de l'aquifère fortement hétérogène et localement karstifiée susceptible d'être à l'origine des rapports de mélange observés présentant des proportions d'eau de rivière faible au vu de la position des ouvrages de production R20 et R21 (très proche rivière). Le choix d'un modèle d'écoulement et de transport par l'approche du milieu poreux équivalent a été discuté et justifié (cf Chapitre 5). Cependant, la sur-estimation des rapports de mélange par le modèle peut être expliquée par cette approche, où les transferts de masse aux travers de conduits karstiques ne peuvent être correctement simulés. On observe par ailleurs des valeurs de transmissivités estimées très élevées, proches des limites pour un milieu poreux, dans l'axe des ouvrages de production. Ces fortes transmissivités peuvent être le signe de réseaux de conduits karstiques, où l'on est en limite de validité de la loi de Darcy pour un modèle à milieu poreux équivalent.

## Synthèse 1/2

### **La construction du modèle d'écoulement et de transport comporte l'approche suivante :**

- le choix d'un modèle 2D (hypothèse de Dupuit-Forchheimer) à milieu poreux équivalent pour simuler l'écoulement et le transport ;
- paramétrisation des propriétés hydrodynamiques avec un ensemble de points pilotes afin de prendre en compte les hétérogénéités du système dans un contexte où elles ne sont pas connues a priori ;
- Simulation des échanges nappe-rivière par une condition de type Cauchy suivant l'approche développée dans le Chapitre 3 ;
- afin de pallier aux problèmes de temps de calcul liés à la simulation classique des observations de transport par les modèles advectif-dispersifs, nous avons développé un modèle équivalent pour simuler les observations de rapport de mélange nappe-rivière au moyen du code de suivi de particule MODPATH. Cette approche a été validée avec le modèle classique MT3DMS et expérimentée sur un modèle conceptuel d'échange nappe-rivière.

### **L'estimation des paramètres a été conduite avec l'approche suivante :**

- utilisation de l'Algorithme de Gauss-Levenberg Marquardt (GLMA) de la suite PEST++ ;
- régularisation hybride Tikhonov-TSVD pour stabiliser le processus d'estimation des paramètres et tendre vers un problème "bien-posé" ;
- estimation des paramètres à partir de 2 modèles, un modèle d'écoulement transitoire pour les observations de charges et de débits couplé à un modèle de transport (modèle équivalent de suivi de particules) permanent pour les simulations de rapport de mélange aux ouvrages de production ;

## Synthèse 2/2

**L'estimation des paramètres conduit aux résultats suivants :**

- bonne simulation des charges et débits observés et simulation satisfaisante des rapports de mélanges nappe-rivière dans les ouvrages de production ;
- validation des résultats obtenus à partir du modèle équivalent de suivi de particule avec le modèle original MT3D ;
- les paramètres estimés à partir du modèle couplé écoulement-transport (approche n°2) montre : i) des effets moindres de la régularisation de Tikhonov afin de respecter les observations de rapport de mélanges ii) la nécessité de créer un champ de transmissivité plus hétérogène pour satisfaire les rapports de mélange ;
- les paramètres estimés à partir du modèle couplé écoulement-transport (approche n°2) montrent une cohérence entre le champ de transmissivité estimé et les observations de terrain (géophysique, structures géologiques liées à la faille de Bordeaux).

**Les analyses d'incertitude paramétrique et prédictive indiquent :**

- la cohérence des résultats de l'analyse linéaire avec l'approche NSMC ;
- une faible corrélation entre paramètre et sensibilité élevée pour la majorité des paramètres (hormis  $FN$ ), les paramètres sont donc a priori bien identifiables ;
- des intervalles de confiance et incertitude larges pour les paramètres  $C_{GHB\_N}$ ,  $C_{GHB\_S}$ ,  $C_{galerie}$  et  $C_{Barbacanes}$  qui peuvent s'expliquer par la présence d'une zone de point pilote liés corrélée aux paramètres  $C_{GHB\_N}$  et  $C_{GHB\_S}$ . Pour les paramètres  $C_{galerie}$  et  $C_{Barbacanes}$ , la fonction objectif hybride ne permet pas une représentativité des observations de débit suffisante pour rejeter les valeurs de  $C_{galerie}$  et  $C_{Barbacanes}$  incohérentes lors de la re-calibration des générations NSMC ;
- l'écart-type sur les valeurs de transmissivité aux points pilotes des tirages NSMC indique une diminution de l'incertitude dans les zones proches des ouvrages de production où l'information sur les rapports de mélange a été apporté ;
- l'incertitude prédictive indique une bonne prédiction de la recharge. Une incertitude très élevée sur les volumes échangés de la nappe à la rivière causée par l'incertitude sur les transmissivités (donc sur les charges, et donc sur la différence entre niveau de rivière et niveau de l'aquifère), ainsi que la mauvaise simulation des débits des drains par les tirages NSMC.

# Quatrième partie

## Simulation



# Chapitre 8

## Apport de la modélisation des échanges nappe-rivière à la gestion du champ captant

### 8.1 Introduction

Un modèle d'écoulement et de transport a été développé dans la partie III. Les paramètres de ce modèle ont été estimés et les incertitudes paramétriques et prédictives ont été évaluées. Cette partie a permis de répondre à l'objectif principal de cette thèse qui était de mettre en place un outil de gestion de la ressource en eau sur le champ captant de Thil-Gamarde. Cet outil peut maintenant servir à tester des scénarios alternatifs de gestion visant à limiter l'influence de vecteurs de pollution, telle que la Jalle, sur la ressource en eau.

Ce chapitre vise à illustrer l'emploi de cet outil, à travers la caractérisation des échanges nappe-rivière et l'évaluation de scénarios alternatifs de gestion.

### 8.2 Caractérisation des échanges nappe-rivière

Le modèle réalisé au cours de cette thèse permet de caractériser les écoulements et le transport en prenant en compte les échanges entre la nappe et la rivière traversant le champ captant de Thil-Gamarde. L'étude des débits échangés en régime permanent pour des conditions d'exploitation actuelles et pour des conditions hydrologiques en hautes et basses eaux (voir Tableau 8.1) fait état de débits linéiques nets échangés (débits par unité de longueur de cours d'eau) allant de 0 à  $0.4 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1} \text{ m}^{-1}$  en hautes eaux et de  $0.07$  à  $0.28 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1} \text{ m}^{-1}$  en basses eaux (Figure 8.1).

Les débits échangés sont plus importants en hautes eaux qu'en basses eaux. Le gradient nappe - rivière est plus important en hautes eaux, en partie parce que les niveaux d'eau dans les drains (Galerie et Barbacanes) est le même en hautes et basses eaux.

Une caractéristique marquante est que l'ensemble de la section de rivière considéré

	Hautes eaux	Moyennes eaux	Basses eaux
Jalle amont seuil	11.2 m	10.7 m	10.2 m
Jalle aval seuil	10 m	9.5 m	9 m
Galerie	8.5 m	8.5 m	8.5 m
Barbacanes	8.4 m	8.4 m	8.4 m
R20	200 m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup>	200 m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup>	200 m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup>
R21	300 m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup>	300 m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup>	300 m <sup>3</sup> h <sup>-1</sup>

Tableau 8.1 : Conditions hydrologiques et débits / niveaux aux ouvrages de production

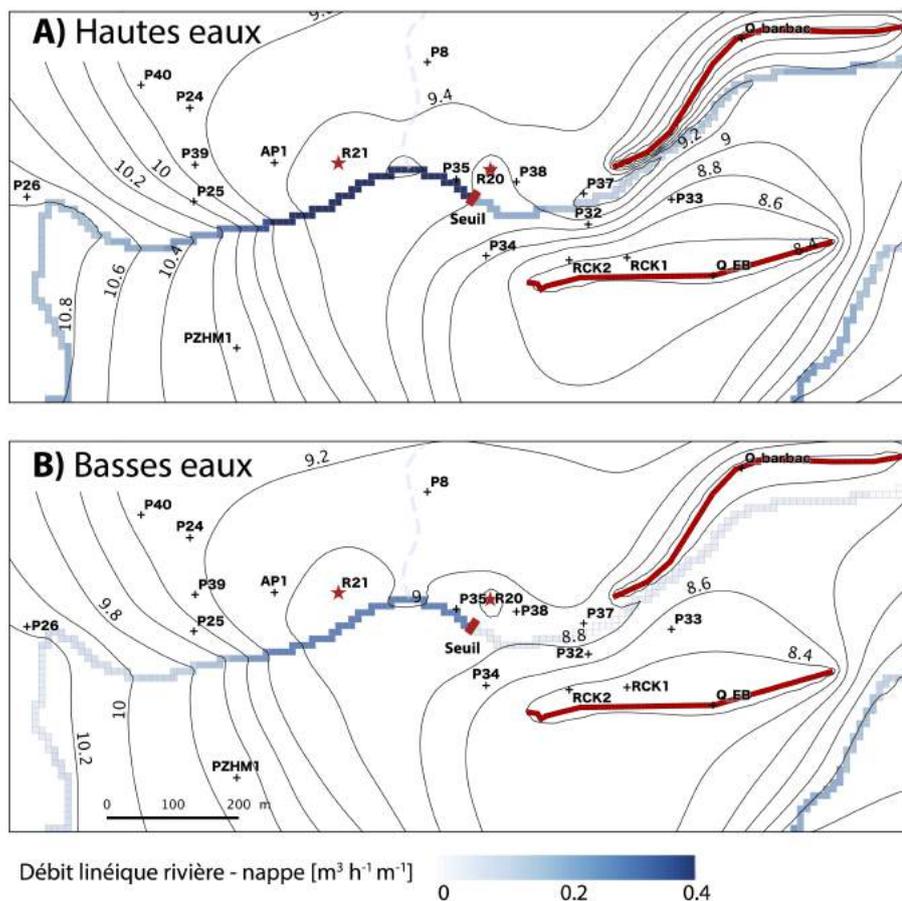
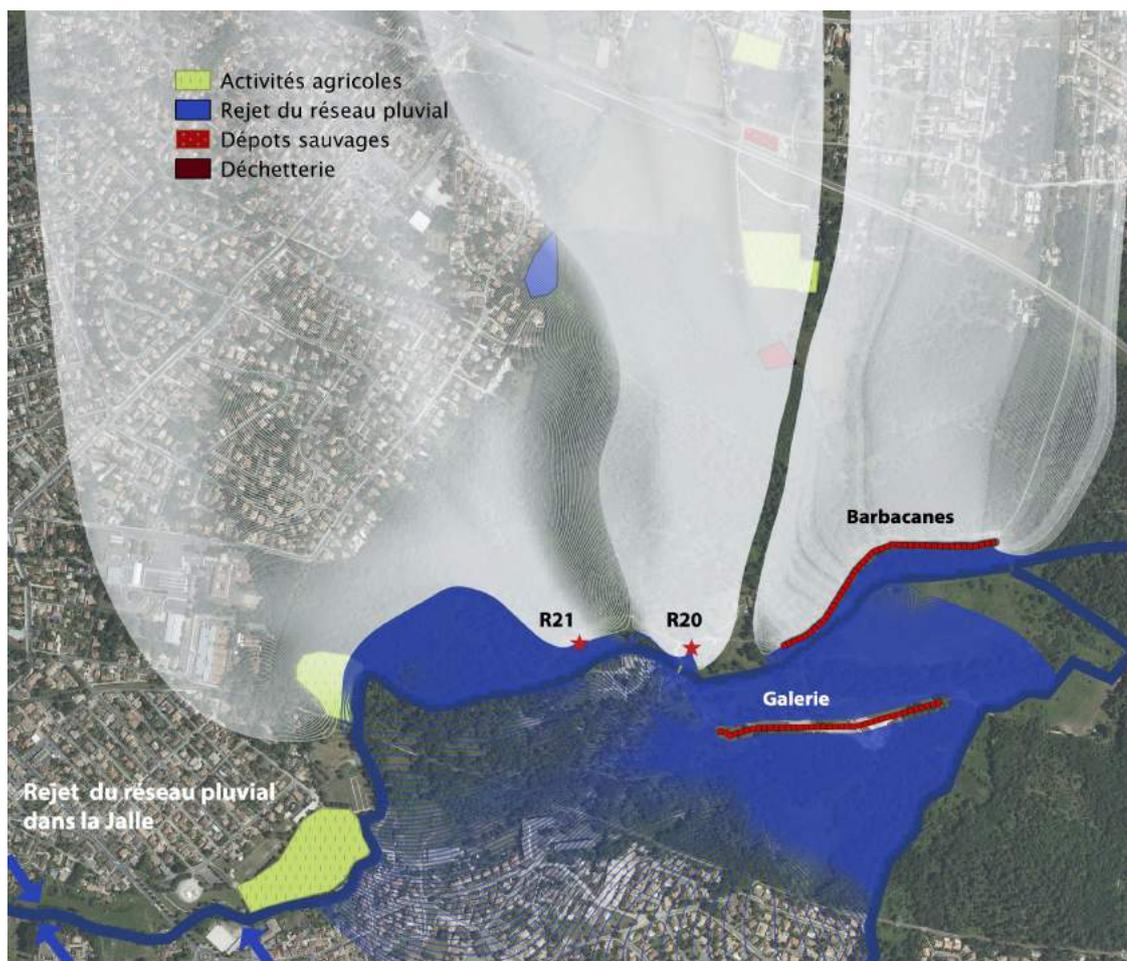


Figure 8.1 : Carte piézométrique et volume rivière-nappe échangé simulé en hautes eaux A, et en basses eaux B.



**Figure 8.2 :** Lignes de courant simulées pour chacun des ouvrages du champ captant de Thil-Gamarde et foyers potentiel de pollution modifié d'après Caballero (2007). Les lignes de courant bleues représentent les particules interceptant la rivière Jalle, les particules blanches représentent les particules n'interceptant pas la Jalle

est en perte (échange dans le sens rivière vers nappe). L'influence du seuil est mis en évidence par la diminution abrupte des débits échangés entre l'amont et l'aval. Les zones de pertes importantes se situent proches des ouvrages R20 et R21 en amont du seuil. Le ruisseau Sainte-Christine apporte également des débits non négligeables.

Le suivi de particules, réalisé à contre-courant depuis les ouvrages de production, permet d'identifier la zone d'alimentation de chacun des ouvrages (Figure 8.2). En ajoutant, à partir d'un traitement sur un SIG, l'image aérienne de la zone d'étude cela permet de savoir si une zone potentiellement contaminée se situe dans la zone d'alimentation d'un ouvrage (voir Figure 4.5 section 4.3.2).

Pour les conditions d'exploitation actuelles et pour des conditions hydrologiques en moyennes eaux (Tableau 8.1, Figure 8.2) .

- L'ouvrage R21 couvre une large zone d'appel et est alimenté à hauteur d'environ 30% en eau de rivière depuis un tronçon d'environ 500 m de la rivière

Jalle. L'autre part de son alimentation est assurée par la partie aquifère présente au nord de l'ouvrage. L'alimentation venant du nord traverse des zones urbanisées à risque de pollution (cf Chapitre 4).

- La zone d'appel de l'ouvrage R20 est plus restreinte et son alimentation par la rivière à hauteur d'environ 10% est assurée par un court tronçon de rivière de quelques dizaines de mètres. Bien que l'ouvrage soit proche de la rivière, le reste de son alimentation est assuré par la partie d'aquifère présente au nord de l'ouvrage, qui s'explique très bien ici par l'anomalie de transmissivité au nord, illustrée par le suivi de particule (chapitre 7). Cette alimentation par le nord présente les mêmes problématiques que pour l'ouvrage R21.
- Les barbacanes sont alimentées à hauteur d'environ 30% par un tronçon de rivière équivalent à sa longueur (400 m) et par la partie de l'aquifère au nord.
- La galerie est majoritairement alimentée par la Jalle et le ruisseau Sainte - Christine. Son alimentation se fait majoritairement par le tronçon de la Jalle en aval du seuil, et par la partie aval du ruisseau Sainte - Christine.

Il est important d'insister sur le fait que les rapports de mélanges entre les eaux de surfaces et les eaux souterraines sont caractérisés pour un régime permanent. Ce régime est d'intérêt pour l'étude d'une pollution persistante et prolongée, comme c'était initialement le cas pour la contamination en perchlorate sur le site de Thil Gamarde. La nature de la pollution a changé pendant le projet, passant d'une pollution permanente et chronique au perchlorate par drainage de la nappe par la rivière, à un risque de pollution accidentelle par déversement dans le réseau pluvial. Ainsi ce sont les rapports de mélange pic-à-pic (tels que ceux estimés par traçage ou modèle de transport transitoire) qui deviennent intéressants. En effet, la dispersion lors du transport en milieu poreux atténue les concentrations en pic. De ce fait, l'étude du régime permanent ne peut être que le pire scénario envisageable face à une telle pollution ponctuelle.

### 8.3 Exemples d'application du modèle développé

La pertinence de l'analyse d'un système hydrogéologique en régime permanent dépend des propriétés hydrauliques et des temps de réponse du système étudié (Haitjema, 2006). L'emploi d'un régime permanent est ici justifiée (voir Section 5.4.1.2). Le modèle équivalent de transport avec suivi de particule (Chapitre 6) est également utilisé dans le but de réduire les temps de calcul pour la simulation et l'estimation des incertitudes associées à chaque scénario alternatif de gestion. Chaque scénario sera testé sur l'ensemble des 47 jeux de paramètres



**Figure 8.3 :** Positionnement de la galerie de Gamarde dans le champ captant de Thil-Gamarde, avec le regard Rth, ainsi que le point de pompage EB

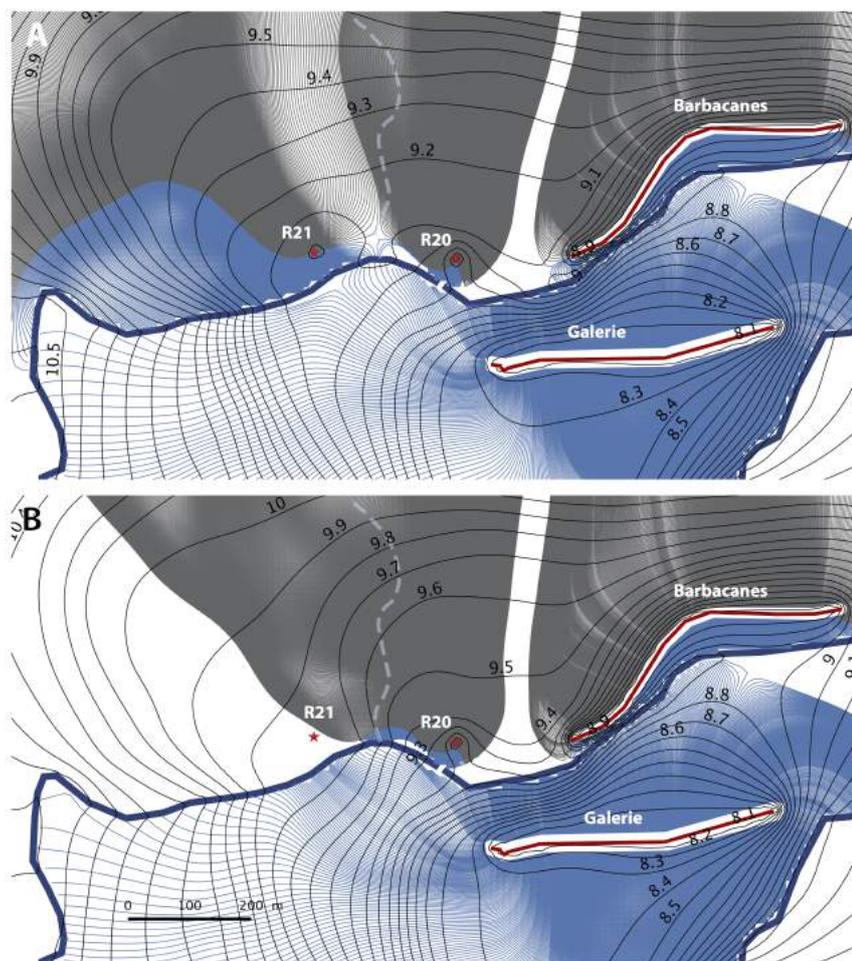
retenus à partir de l'analyse du Null-Space Monte-Carlo (NSMC) permettant d'estimer l'incertitude associée à chaque prédiction.

Les évaluations de scénario alternatifs peuvent chercher à prendre en compte différentes contraintes telles que : le maintien d'un certain volume de production ; le maintien en service de certains ouvrages stratégiques du site ; la minimisation de l'apport d'eau de rivière ; *etc* (Figure 8.3). Pour satisfaire une ou plusieurs de ces contraintes, les scénarios alternatifs à envisager peuvent s'appuyer sur plusieurs stratégies telles que : la modification du schéma d'exploitation à travers la diminution, l'augmentation, ou l'arrêt de l'exploitation de certains ouvrages, la recherche de nouveaux emplacements pour l'implantation d'ouvrage d'exploitation, *etc*.

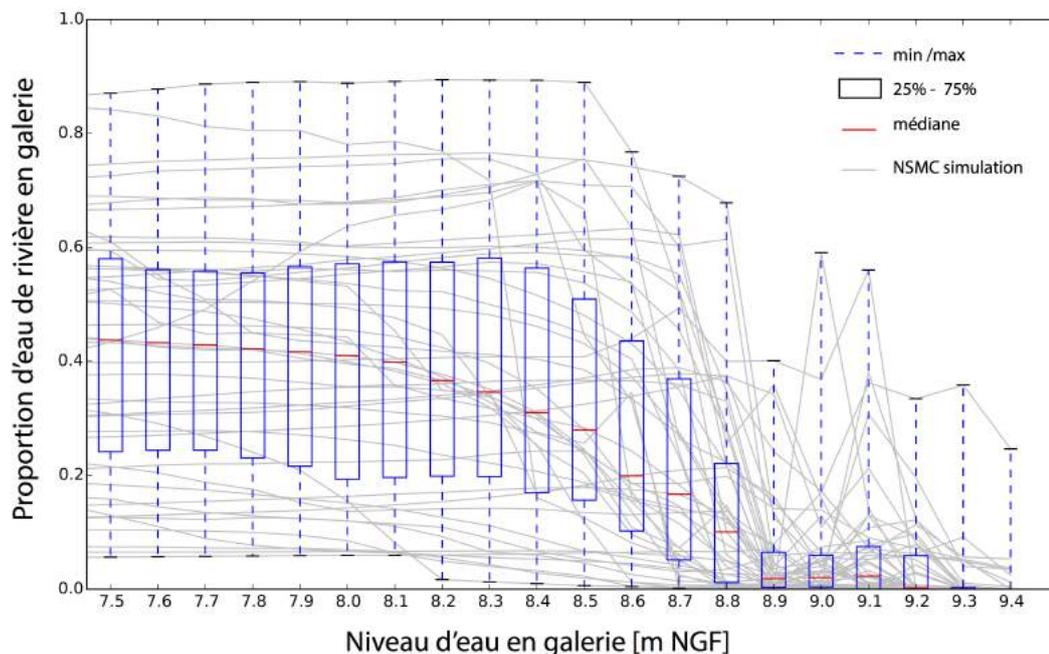
Par exemple on remarque que l'arrêt de l'exploitation de l'ouvrage R21 semble élargir la zone d'appel de l'ouvrage R20, mais ne semble cependant pas augmenter significativement son apport d'eau de rivière (Figure 8.4 B) avec 13% d'eau de rivière en R20 avant l'arrêt du R21 et 14% après l'arrêt. En condition d'arrêt de l'ouvrage R21 (Figure 8.4 B), la Galerie est alimentée en majeure partie d'eau de rivière par la partie amont du seuil. En effet le cône de rabattement de l'ouvrage R21 s'étend au delà de la rivière en rive droite de la Jalle (Figure 8.4 A), une fois l'ouvrage R21 arrêté cela permet un apport d'eau supplémentaire à la Galerie.

### 8.3.1 Évaluation de la vulnérabilité de la Galerie

La Galerie drainante de Gamarde est un point stratégique de la production en eau du champ captant, pouvant fournir jusqu'à plus de  $10\,000\text{ m}^3\text{ j}^{-1}$ , soit plus d'un quart de la production totale du champ captant (Caballero, 2007).



**Figure 8.4 :** Suivi de particules avec l'ensemble des ouvrages en production (A) et l'arrêt des prélèvements dans R21 (B). Les lignes de courant bleues représentent les particules interceptant la rivière Jalle, les particules blanches représentent les particules n'interceptant pas la Jalle

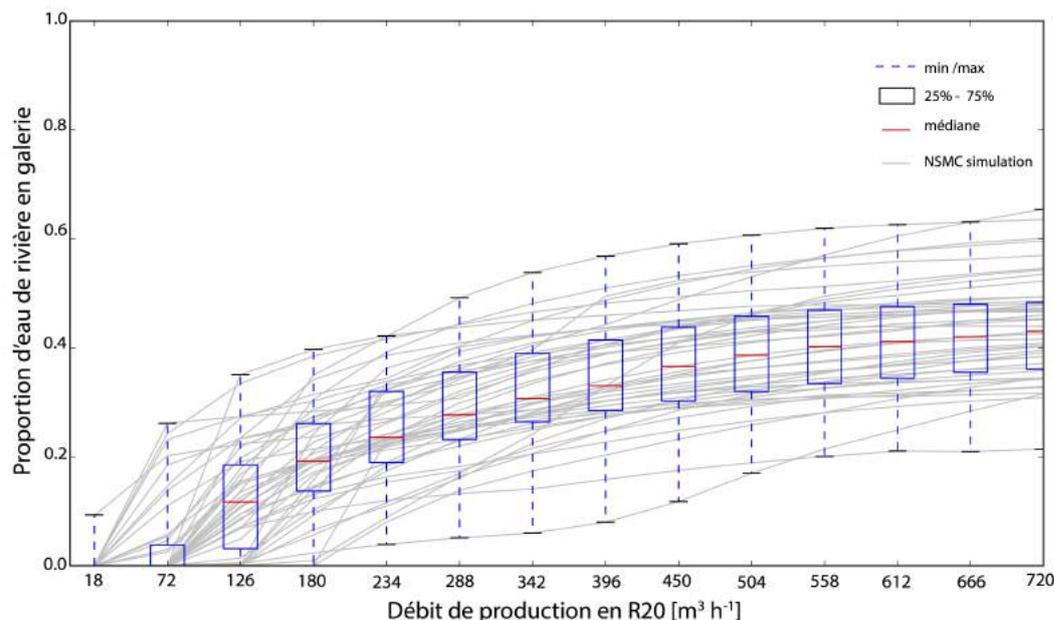


**Figure 8.5 :** Proportion d'eau de rivière en fonction du niveau d'eau en galerie avec les modèles obtenus par NSMC, et diagrammes en boîte associés. Les résultats sont donnés en fonction du niveau de la galerie, et non du débit de production, car ce dernier dépend des paramètres

Les rapports de mélange calculés au niveau du regard de la galerie (point Rth Figure 8.3) ont toujours présenté des proportions d'eau de surface élevées, autour de 90% (Chapitre 4, Section 4.4.2.2). Ce rapport de mélange a été utilisé comme observation pour l'estimation des paramètres, dont les résultats ont été concluants. Cependant pour ce qui est de la gestion de la ressource prélevée en Galerie, l'eau qui arrive au point Rth n'est pas forcément représentatif de l'eau produite par l'ouvrage Galerie puisque le pompage est effectué au niveau du point EB (Figure 8.3). Une des problématiques de gestion est de savoir quel débit peut être prélevé dans l'ouvrage galerie tout en assurant une proportion d'eau de rivière (Jalle) minimale.

C'est sur cette problématique de gestion que se base le scénario illustrant l'utilisation de l'outil développé. Les proportions d'eau de rivière sont simulées pour différents niveaux d'eau en galerie (simulée avec une condition de type Cauchy où un niveau est renseigné, voir chapitre 5) avec chaque jeu de paramètres obtenu par NSMC. Le niveau d'eau en rivière correspond au niveau basses eaux (voir Tableau 8.1).

On observe une forte incertitude sur les proportions d'eau de rivière pour les niveaux d'eau en galerie inférieurs à 8.9 m (Figure 8.5). Au deçà de 8.9 m la majorité des modèles NSMC s'accordent sur une proportion d'eau de rivière en Galerie inférieure à 20%. Cette hauteur d'eau en Galerie correspond à un débit allant de 50 à 300  $\text{m}^3 \text{h}^{-1}$  selon les jeux de paramètres (principalement le paramètre de conductance de la Galerie). Le niveau d'eau en galerie de 8.9 m est



**Figure 8.6 :** Proportion d'eau de rivière en fonction du débit produit en R20 avec les modèles obtenus par NSMC, et diagrammes en boîte associés. Le débit actuel de production est d'environ  $300 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$

proche du niveau d'eau en rivière juste après le seuil (Figure 8.3). Lorsque le niveau en galerie devient supérieur à la hauteur d'eau en rivière en amont du seuil, le gradient hydraulique entre la Galerie et la section de la rivière Jalle en amont du seuil s'inverse et la galerie n'est plus alimentée en majorité par la rivière. Dans l'état actuel des choses ce scénario comporte des incertitudes trop importantes pour prédire correctement le comportement de la galerie pour les niveaux d'eau en galerie inférieurs à 8.9 m (section 8.4).

### 8.3.2 Évaluation de la vulnérabilité de l'ouvrage R20

Afin d'évaluer les résultats de scénario prédictif dans une zone où les incertitudes sont plus réduites, le même type de scénario a été effectué pour l'ouvrage R20 (Figure 8.3).

L'incertitude sur les rapports de mélange est plus réduite pour le scénario sur R20 que sur la Galerie (Figure 8.6), et permet de faire des prédictions avec un intervalle de confiance acceptable. La majorité des modèles se trouvent dans un intervalle d'environ 20% de proportion d'eau de rivière.

## 8.4 Discussion

Ce chapitre illustre l'intérêt de l'outil de modélisation développé pour le test de scénario prédictif de gestion. L'évaluation du scénario sur l'ouvrage Galerie sou-

---

ligne le besoin d'estimer les incertitudes associées aux prédictions d'un modèle de gestion. Comme souligné par Pappenberger and Beven (2006) et Poeter and Hill (1997) l'estimation des incertitudes associées aux modèles hydrogéologiques est nécessaire, bien qu'une part encore importante de la communauté de modélisateur soit encore réticente à les employer.

Ces fortes incertitudes peuvent être expliquées par :

- l'incertitude sur le paramètre  $C_{galerie}$  contrôlant les débits échangés entre l'aquifère et la Galerie ;
- les incertitudes sur les valeurs de transmissivité en rive droite de la Jalle et aux abords de la Galerie (Figure 7.20 Chapitre 7) ;
- les fortes incertitudes sur les débits produits par les barbacanes pouvant affectées les échanges nappe-rivière sur la section de rivière alimentant également la Galerie ;
- les incertitudes sur les débits nappe-rivière échangés.

Cette analyse de scénario souligne certaines incertitudes liées au modèle développé. Cependant plusieurs pistes sont envisageables pour réduire l'incertitude sur les simulations de rapport de mélange dans la Galerie :

- calculer les rapports de mélange pour la Galerie au niveau de son point de production (point EB Figure 8.3) et apporter cette information à l'étape d'estimation des paramètres. Une diminution de l'incertitude a été observée dans les zones où des observations de rapport de mélange ont été apportées à la calibration (Chapitre 7) ;
- même étape pour l'ouvrage Barbacane en rive gauche de la Jalle (Figure 8.3) ;
- création de piézomètres d'observation supplémentaires au sud de la Galerie où l'information est faible.



**Cinquième partie**  
**Conclusions et perspectives**



# Chapitre 9

## Conclusions

Les travaux réalisés dans le cadre de cette thèse ont permis d'améliorer la compréhension et la gestion des systèmes nappe-rivière à l'échelle intermédiaire, avec la modélisation comme outil principal. Le résultat opérationnel est un outil de modélisation qui servira à évaluer des scénarios prédictifs de gestion de la ressource en eau du champ captant de Thil-Gamarde. Nous dressons dans ce dernier chapitre le bilan synthétique de ce travail, en terme de développements méthodologiques originaux et de résultats opérationnels sur le champ captant de Thil-Gamarde. Les principales limites rencontrées dans cette approche sont aussi mentionnées. Cette partie s'achève sur la présentation des perspectives qu'ouvrent ce travail de thèse.

### 9.1 Développements méthodologiques

Différents développements méthodologiques sur la modélisation des échanges nappe-rivière, répliquables à d'autres sites, ont été réalisés dans le cadre de cette thèse.

- Un outil innovant a été développé (Chapitre 3) afin d'estimer une valeur initiale et de régularisation pour le coefficient rivière (*CRIV*) à partir d'informations a priori sur les paramètres physiques mesurables sur le terrain. Une analyse de sensibilité globale a été utilisée pour apprécier l'influence de chacun de ces paramètres sur le coefficient rivière, et a mis en avant la forte dépendance de paramètres souvent négligés : l'anisotropie et la taille des cellules rivières. Ces recherches ont été publiées dans la revue *Groundwater*.
- Devant des temps de calculs souvent rédhibitoires de la simulation du transport par résolution de l'équation d'advection-dispersion (MT3DMS), un modèle de transport convectif de suivi de particules a été développé et validé (Chapitre 6). Le gain de temps considérable, jusqu'à 90 fois plus rapide, permet de multiples exécutions de modèle pour l'estimation des paramètres et la quantification des incertitudes.
- Grâce à ce modèle de transport convectif, les rapports de mélange entre les eaux de surface et les eaux souterraine, mesurables sur le terrain, peuvent

être intégrés dans l'estimation des paramètres et permettre de réduire l'incertitude des modèles d'échanges nappe-rivière.

- L'estimation des paramètres a été effectuée avec l'algorithme PEST++ à partir du modèle d'écoulement, couplé au modèle équivalent de suivi de particules. Cela conduit à une fonction objectif hybride avec des observations de charges, de débits et de rapports de mélange.
- L'information structurelle obtenue par investigation de terrain (géophysique, géologie, géomorphologie) permet de valider en partie les paramètres estimés par modélisation inverse.
- L'évaluation des incertitudes paramétriques et prédictives a été réalisée par la méthode du Null-Space Monte Carlo qui est assez rarement utilisée sur des cas d'application réels.

## 9.2 Résultats opérationnels

Plusieurs résultats spécifiques au domaine d'étude ont été obtenus tout au long de cette thèse.

- Des investigations de terrain (Chapitre 4) ont permis d'obtenir de l'information a priori sur les paramètres hydrodynamiques du système, des observations de l'état du système (charges, débits d'exploitation, rapports de mélange entre les eaux de surface et les eaux souterraines) et des informations structurelles par investigation géophysique pour contraindre la modélisation hydrogéologique.
- Le sens et l'intensité des échanges nappe-rivière du champ captant de Thil-Gamarde ont été estimés sur le domaine d'étude. Ils sont contraints par le régime de la Jalle et les débits des ouvrages de productions, perturbant le régime naturel d'écoulement.
- Les investigations de terrain et les résultats de l'estimation des paramètres ont mis en avant un aquifère hétérogène et des figures de karstification à l'origine d'écoulements rapides.
- Bien que proche de la Jalle (<100 m) les ouvrages R20 et R21 sont alimentés en majorité par la partie aquifère au nord de ces ouvrages (environ 90% pour R20 et 70% pour R21). En revanche la Galerie est alimentée en majorité par la rivière (environ 90%).
- Le seuil, décalant le niveau d'eau en rivière à proximité des ouvrages de production, a une influence majeure sur les échanges et les rapports de mélanges nappe-rivière aux ouvrages de production.

- Le potentiel de l’outil de modélisation du champ captant de Thil-Gamarde développé dans le cadre de cette étude, a été illustré au travers de scénarios prédictifs de gestion assortis de leurs incertitudes, et permet des résultats opérationnels probants.

## 9.3 Limites

Les approches utilisées et développées présentent certaines limites qu’il est important de souligner.

L’outil développé pour estimer le paramètre *CRIV* ne prend pas en compte les états de déconnexion entre la nappe et la rivière. L’approche implique que l’ensemble des écoulements à composantes verticales (flux convergents ou divergents) autour de la rivière soient compris dans une seule cellule du modèle. Cela implique que la taille des cellules nécessaires au bon emploi de la méthode soit assez grande (100 m dans notre cas), pour que tous les flux convergents aient lieu à l’intérieur même de la cellule où s’applique la condition limite rivière. Ceci s’avère contraignant lorsque certains modèles nécessitent un niveau de détail plus fin que la taille des mailles requise. Les flux peuvent cependant être bien estimés au prix d’une compensation de cette erreur structurelle par un ajustement des propriétés hydrodynamiques des cellules proches rivière, qui perdent alors une partie de leur sens physique.

Le modèle équivalent de suivi de particules se montre satisfaisant pour la réduction du temps de calcul. Cependant la non prise en compte de la dispersion limite son utilisation à la simulation de rapport de mélange sur des points sources (puits, drain) et en régime permanent.

De plus, l’approche du milieu poreux équivalent, pour simuler un milieu partiellement karstifié, ne permet pas de reproduire les vitesses de transfert réelles dans l’aquifère. Cette approche limite l’utilisation du modèle à la caractérisation des pollutions persistantes et prolongées, et ne permet pas de simuler les pollutions ponctuelles et les temps de transfert associés.

La fonction objectif hybride utilisée lors de l’estimation des paramètres a donné des résultats satisfaisants. Cependant lors de la procédure du Null-Space Monte Carlo, les débits ont pu être très mal simulés sans que la fonction objectif ne soit suffisamment dégradée pour rejeter les paramètres à l’origine de cette mauvaise simulation.

L’analyse d’incertitude a été menée par l’utilisation de multiples jeux de paramètres (NSMC) basés sur une seule structure de modèle. La faiblesse principale de cette approche réside dans le fait que toutes les sources d’incertitude sont alors attribuées à l’erreur sur les paramètres, sans tenir compte de l’incertitude sur la conceptualisation du modèle qui peut représenter un tiers des incertitudes du modèle (Rojas et al., 2008).



# Chapitre 10

## Perspectives

### 10.1 Perspectives de recherche

Au vu des limites précédemment énoncées et des résultats acquis au cours de cette thèse, les perspectives de recherches pourraient se porter sur les points suivants.

- Réaliser l'estimation des paramètres et l'analyse d'incertitudes sur de multiples conceptualisations de modèle (e.g (*General Likelihood Uncertainty Estimation* (Beven and Binley, 1992)), Hublart et al. (2015); Rojas et al. (2008)). Une réflexion reste cependant à mener pour trouver une démarche permettant de réaliser un ensemble de conceptualisations vraisemblables (cette réflexion constitue un sujet actif de recherche, discuté notamment au cours des rencontres avec le *Darcy lecturer* 2016 (Ferre, 2016)).
- La méthode du Null-Space Monte Carlo est une méthode dérivée du Monte Carlo (approche bayésienne) mais qui présente ses limites (hypothèse linéaire pour le Null Space). On pourrait donc préférer les méthodes de Monte Carlo, mais qui sont cependant très exigeantes en temps de calcul.
- Des efforts pourraient être réalisés pour réduire les temps de calcul du modèle d'écoulement afin de pouvoir réaliser le type d'approche précédemment décrite.
- Envisager une méthode de pondération des observations dans la fonction objectif hybride (e.g Madsen (2000); Yapo et al. (1998)), permettant d'éviter que certains groupes d'observation, notamment les débits, puissent être très mal simulés sans dégrader suffisamment la fonction objectif pour rejeter les paramètres estimés lors de la procédure du NSMC.
- Mettre en place un modèle de transport réactif, pour prendre en compte l'éventuelle dégradation des contaminants.
- Déterminer, avec le modèle développé, le ou les schémas de gestion optimaux de la ressource en eau du champ captant étudié, en fonction de contraintes (réduction de l'apport d'eau de rivière, débit de production maximale, *etc*),

à partir d'algorithmes d'optimisation (*Particle Swarm Optimization* PSO, *Genetic Algorithm* GA e.g Onwunalu and Durlinsky (2010)).

## 10.2 Perspectives opérationnelles

Cette thèse a permis une meilleure compréhension du fonctionnement du champ captant de Thil-Gamarde et la mise en place d'un outil de gestion de la ressource en eau basé sur un modèle numérique. Les perspectives opérationnelles consistent en majeure partie à la mise en pratique de l'outil développé à travers la proposition de scénarios de gestion. Une classification de ces scénarios pourra être dressée. Leur classement en terme de vulnérabilité, notamment à la rivière, et l'optimisation du schéma des scénarios les plus intéressants sera à conduire, tout en conservant un débit de production d'environ  $1000 \text{ m}^3 \text{ h}^{-1}$  pour l'ensemble du champ captant. Pour cela plusieurs stratégies seront envisagées :

- la modification de la répartition des prélèvements entre les ouvrages actuels (puits R20, R21, Galerie de Gamarde, Barbacanes) ;
- la simulation de nouveaux ouvrages de production où différentes localisations et profondeurs de productions seront envisagées ;
- la suppression du seuil du moulin de Thil ;
- la simulation d'une barrière hydraulique entre la rivière et la galerie.

Ces scénarios peuvent éventuellement être associés (e.g suppression du seuil avec la réalisation d'un nouvel ouvrage).

Des investigations de terrain supplémentaires seront également à conduire :

- évaluation des rapports de mélange sur l'ensemble de l'ouvrage Galerie (point EB) et sur les Barbacanes ;
- investigations géophysiques complémentaires pour caractériser les structures géologiques générales et éventuellement au droit des zones identifiées comme intéressantes pour l'implantation de nouveaux forages.

De telles observations permettraient de contraindre et d'affiner les prédictions du modèle. Suite à ces recherches, la méthodologie appliquée permettra de proposer et d'établir des scénarios de gestion opérationnels sur le champ captant.

# Références

- Abusaada, M. and Sauter, M. (2013). Studying the flow dynamics of a karst aquifer system with an equivalent porous medium model. *Groundwater*, 51(4) :641–650.
- Anderman, E. R. and Hill, M. C. (1997). Advective-transport observation (adv) package, a computer program for adding advective-transport observations of steady-state flow fields to the three-dimensional ground-water flow parameter-estimation model modflowp. Technical report, US Geological Survey : Information Services [distributor],.
- Anderson, E. I. (2003a). An analytical solution representing groundwater–surface water interaction. *Water Resources Research*, 39(3) :1071.
- Anderson, E. I. (2003b). The effective resistance to vertical flow in dupuit models. *Advances in water resources*, 26(5) :513–523.
- Anderson, E. I. (2005). Modeling groundwater-surface water interactions using the dupuit approximation. *Advances in water resources*, 28(4) :315–327.
- Anderson, M. P., Woessner, W. W., and Hunt, R. J. (2015). *Applied groundwater modeling : simulation of flow and advective transport*. Academic press.
- Anibas, C., Buis, K., Verhoeven, R., Meire, P., and Batelaan, O. (2011). A simple thermal mapping method for seasonal spatial patterns of groundwater-surface water interaction. *Journal of hydrology*, 397(1) :93–104.
- Anses (2011). Avis de l’agence nationale de sécurité sanitaire de l’alimentation, de l’environnement et du travail relatif a la présence d’ions perchlorate dans le lait infantile et dans l’eau destinée à la consommation humaine en france. Technical report, Agence nationale de sécurité sanitaire de l’alimentation, de l’environnement et du travail.
- Ashford, R. D. (1994). *Ashford’s dictionary of industrial chemicals : properties, production, uses*. Wavelength.
- Aster, R., Borchers, B., and Thurber, C. (2005). *Parameter estimation and inverse problems*. Elsevier Academic Press : Burlington.

- Bailly, D. (2009). *Vers une modélisation des écoulements dans les massifs très fissurés de type karst : étude morphologique, hydraulique et changement d'échelle*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- Bakker, M., Post, V., Langevin, C. D., Hughes, J. D., White, J., Starn, J., and Fienen, M. N. (2016). Scripting modflow model development using python and flopy. *Groundwater*, XX :XXX.
- Bear, J. (2013). *Dynamics of fluids in porous media*. Courier Corporation.
- Ben Simon, R., Bernard, S., Meurville, C., and Rebour, V. (2015). Flow-through stream modeling with modflow and mt3d : Certainties and limitations. *Groundwater*, 53(6) :967–971.
- Bernier, J., Parent, E., and Boreux, J.-J. (2000). *Statistique pour l'environnement. Traitement bayésien de l'incertitude*. Editions Tec & Doc.
- Beven, K. and Binley, A. (1992). The future of distributed models : model calibration and uncertainty prediction. *Hydrological processes*, 6(3) :279–298.
- Binley, A., Hubbard, S. S., Huisman, J. A., Revil, A., Robinson, D. A., Singha, K., and Slater, L. D. (2015). The emergence of hydrogeophysics for improved understanding of subsurface processes over multiple scales. *Water resources research*, 51(6) :3837–3866.
- Blosch, G., Thybo, H., and Savenije, H. (2015). *A voyage trough scale*. European Geoscience Union.
- Boano, F., Revelli, R., and Ridolfi, L. (2011). Water and solute exchange through flat streambeds induced by large turbulent eddies. *Journal of Hydrology*, 402(3) :290–296.
- Borghi, A., Renard, P., and Jenni, S. (2012). A pseudo-genetic stochastic model to generate karstic networks. *Journal of hydrology*, 414 :516–529.
- Bourgault, G. (1997). Spatial declustering weights. *Mathematical geology*, 29(2) :277–290.
- Brookfield, A., Sudicky, E., Park, Y.-J., and Conant, B. (2009). Thermal transport modelling in a fully integrated surface/subsurface framework. *Hydrological processes*, 23(15) :2150–2164.
- Brunner, P., Cook, P. G., and Simmons, C. T. (2009). Hydrogeologic controls on disconnection between surface water and groundwater. *Water Resources Research*, 45(1) :1422.
- Brunner, P., Cook, P. G., and Simmons, C. T. (2011). Disconnected surface water and groundwater : from theory to practice. *Ground Water*, 49(4) :460–467.

- Burrows, W. and Doherty, J. (2015). Efficient calibration/uncertainty analysis using paired complex/surrogate models. *Groundwater*, 53(4) :531–541.
- Caballero (2007). Champ captant de thil-gamarde déclaration d'utilité publique. Technical report, Société d'Ingénierie pour l'Eau et l'Environnement.
- Cabaret, O. (2011). *Caractérisation physique et approche numérique du rôle des aquitards dans les systèmes aquifères multicouches-Application au complexe tertiaire nord-aquitain*. PhD thesis, Université Michel de Montaigne-Bordeaux III.
- Canik, B. (1968). *Etude géologique et hydrogéologique du bassin versant de la Jalle de Saint-Médard...* PhD thesis, Université de Bordeaux. Faculté des sciences.
- Cardenas, M. B. (2009). Stream-aquifer interactions and hyporheic exchange in gaining and losing sinuous streams. *Water Resources Research*, 45(6) :6429.
- Cardenas, M. B. and Markowski, M. S. (2010a). Geoelectrical imaging of hyporheic exchange and mixing of river water and groundwater in a large regulated river. *Environmental science & technology*, 45(4) :1407–1411.
- Cardenas, M. B. and Markowski, M. S. (2010b). Geoelectrical imaging of hyporheic exchange and mixing of river water and groundwater in a large regulated river. *Environmental science & technology*, 45(4) :1407–1411.
- Cardenas, M. B. and Wilson, J. (2007a). Hydrodynamics of coupled flow above and below a sediment–water interface with triangular bedforms. *Advances in water resources*, 30(3) :301–313.
- Cardenas, M. B. and Wilson, J. L. (2007b). Exchange across a sediment–water interface with ambient groundwater discharge. *Journal of hydrology*, 346(3) :69–80.
- Carniato, L., Schoups, G., van de Giesen, N., Seuntjens, P., Bastiaens, L., and Sapion, H. (2015). Highly parameterized inversion of groundwater reactive transport for a complex field site. *Journal of contaminant hydrology*, 173 :38–58.
- Carrera, J., Alcolea, A., Medina, A., Hidalgo, J., and Slooten, L. J. (2005). Inverse problem in hydrogeology. *Hydrogeology journal*, 13(1) :206–222.
- Carrera, J. and Neuman, S. P. (1986). Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions : 1. maximum likelihood method incorporating prior information. *Water Resources Research*, 22(2) :199–210.
- Carrera, J., Vazquez-Sune, E., Castillo, O., and Sanchez-Vila, X. (2004). A methodology to compute mixing ratios with uncertain end-members. *Water resources research*, 40(12) :W12101–1.

- Chen, X. (2000). Measurement of streambed hydraulic conductivity and its anisotropy. *Environmental Geology*, 39(12) :1317–1324.
- Cheng, C., Song, J., Chen, X., and Wang, D. (2011). Statistical distribution of streambed vertical hydraulic conductivity along the platte river, nebraska. *Water resources management*, 25(1) :265–285.
- Christiansen, H., Hill, M. C., Rosbjerg, D., and Jensen, K. H. (1995). Three-dimensional inverse modelling using heads and concentrations at a danish landfill. *IAHS Publications-Series of Proceedings and Reports-Intern Assoc Hydrological Sciences*, 227 :167–176.
- Cook, P. G. (2013). Estimating groundwater discharge to rivers from river chemistry surveys. *Hydrological Processes*, 27(25) :3694–3707.
- Cousquer, Y., Pryet, A., Flipo, N., Delbart, C., and Dupuy, A. (2017). Estimating river conductance from prior information to improve surface-subsurface model calibration. *Ground Water*, XX :XX.
- Datry, T., Dole-Olivier, M.-J., Marmonier, P., Claret, C., Perrin, J.-F., Lafont, M., and Breil, P. (2008). La zone hyporhéique, une composante à ne pas négliger dans l'état des lieux et la restauration des cours d'eau. *Ingénieries-EAT*, 54(54) :p-3.
- de Marsily, G. (1986). Quantitative hydrogeology. Technical report, Paris School of Mines, Fontainebleau.
- de Marsily, G. (2009). *L'eau, un trésor en partage*. Dunod Paris.
- de Marsily, G., Lavedan, G., Boucher, M., and Fasanino, G. (1984). Interpretation of interference tests in a well field using geostatistical techniques to fit the permeability distribution in a reservoir model. *Geostatistics for natural resources characterization, Part, 2* :831–849.
- Delay, F., Ackerer, P., and Danquigny, C. (2005). Simulating solute transport in porous or fractured formations using random walk particle tracking. *Vadose Zone Journal*, 4(2) :360–379.
- Delottier, H., Pryet, A., and Dupuy, A. (2016). Why should practitioners be concerned about predictive uncertainty of groundwater management models? *Water Resources Management*, xx :1–13.
- Derx, J., Blaschke, A., and Blöschl, G. (2010). Three-dimensional flow patterns at the river-aquifer interface a case study at the danube. *Advances in Water Resources*, 33(11) :1375–1387.
- Discacciati, M., Miglio, E., and Quarteroni, A. (2002). Mathematical and numerical models for coupling surface and groundwater flows. *Applied Numerical Mathematics*, 43(1) :57–74.

- Doherty, J. (2003). Ground water model calibration using pilot points and regularization. *Ground Water*, 41(2) :170–177.
- Doherty, J. (2010). *PEST, Model-independent parameter estimation - user manual (5th ed., with slight additions)*. Watermark Numerical Computing.
- Doherty, J. (2015). *Calibration and uncertainty analysis for complex environmental models*. Watermark Numerical Computing.
- Doherty, J., Brebber, L., and Whyte, P. (1994). *PEST : Model-independent parameter estimation*, volume 122. Watermark Numerical Computing.
- Doherty, J. and Skahill, B. E. (2006). An advanced regularization methodology for use in watershed model calibration. *Journal of Hydrology*, 327(3) :564–577.
- Doherty, J. and Welter, D. (2010). A short exploration of structural noise. *Water Resources Research*, 46(5) :5525.
- Doherty, J. E., Hunt, R. J., and Tonkin, M. J. (2011). *Approaches to highly parameterized inversion : A guide to using PEST for model-parameter and predictive-uncertainty analysis*. US Department of the Interior, US Geological Survey.
- Doppler, T., Franssen, H.-J. H., Kaiser, H.-P., Kuhlman, U., and Stauffer, F. (2007). Field evidence of a dynamic leakage coefficient for modelling river–aquifer interactions. *Journal of Hydrology*, 347(1) :177–187.
- Dujardin, J., Anibas, C., Bronders, J., Jamin, P., Hamonts, K., Dejonghe, W., Brouyère, S., and Batelaan, O. (2014). Combining flux estimation techniques to improve characterization of groundwater–surface-water interaction in the zenne river, belgium. *Hydrogeology Journal*, 22(7) :1657–1668.
- Ebel, B. A., Mirus, B. B., Heppner, C. S., VanderKwaak, J. E., and Loague, K. (2009). First-order exchange coefficient coupling for simulating surface water–groundwater interactions : Parameter sensitivity and consistency with a physics-based approach. *Hydrological Processes*, 23(13) :1949–1959.
- Ellis, P. A., Mackay, R., and Rivett, M. O. (2007). Quantifying urban river–aquifer fluid exchange processes : a multi-scale problem. *Journal of contaminant hydrology*, 91(1) :58–80.
- Emsellem, Y. and De Marsily, G. (1971). An automatic solution for the inverse problem. *Water Resources Research*, 7(5) :1264–1283.
- Engeler, I., Franssen, H. H., Müller, R., and Stauffer, F. (2011). The importance of coupled modelling of variably saturated groundwater flow-heat transport for assessing river–aquifer interactions. *Journal of Hydrology*, 397(3) :295–305.

- Faybishenko, B. A., Javandel, I., and Witherspoon, P. A. (1995). Hydrodynamics of the capture zone of a partially penetrating well in a confined aquifer. *Water Resources Research*, 31(4) :859–866.
- Ferre, T. (2016). Topics for discussion. <https://darcylecture2016.wordpress.com/>.
- Fienen, M., Hunt, R., Krabbenhoft, D., and Clemo, T. (2009a). Obtaining parsimonious hydraulic conductivity fields using head and transport observations : A bayesian geostatistical parameter estimation approach. *Water Resources Research*, 45(8) :8405.
- Fienen, M. N., Muffels, C. T., and Hunt, R. J. (2009b). On constraining pilot point calibration with regularization in pest. *Ground water*, 47(6) :835–844.
- Fleckenstein, J. H., Krause, S., Hannah, D. M., and Boano, F. (2010). Groundwater-surface water interactions : New methods and models to improve understanding of processes and dynamics. *Advances in Water Resources*, 33(11) :1291–1295.
- Fleckenstein, J. H., Niswonger, R. G., and Fogg, G. E. (2006). River-aquifer interactions, geologic heterogeneity, and low-flow management. *Groundwater*, 44(6) :837–852.
- Flipo, N. (2013). Modélisation des hydrosystèmes continentaux pour une gestion durable de la ressource en eau. habilitation a diriger des recherches, universit pierre et marie curie.
- Flipo, N., Monteil, C., Poulin, M., Fouquet, C., and Krimissa, M. (2012). Hybrid fitting of a hydrosystem model : Long-term insight into the beauce aquifer functioning (france). *Water Resources Research*, 48(5) :5509.
- Flipo, N., Mouhri, A., Labarthe, B., Biancamaria, S., Rivière, A., and Weill, P. (2014). Continental hydrosystem modelling : the concept of nested stream–aquifer interfaces. *Hydrology and Earth System Sciences*, 18(8) :3121–3149.
- Frontier, S., Davoult, D., Gentilhomme, V., and Lagadeuc, Y. (2001). *Statistique pour les sciences de la vie et de l’environnement : cours et exercices corrigés*. Dunod.
- Fuller, C. C. and Harvey, J. W. (2000). Reactive uptake of trace metals in the hyporheic zone of a mining-contaminated stream, pinal creek, arizona. *Environmental Science & Technology*, 34(7) :1150–1155.
- Furman, A. (2008). Modeling coupled surface–subsurface flow processes : a review. *Vadose Zone Journal*, 7(2) :741–756.
- Gaffield, S. J., Bradbury, K., and Potter, K. W. (1998). *Hydrologic assessment of the Kickapoo Watershed, southwestern Wisconsin*. Wisconsin Geological and Natural History Survey.

- Gallagher, M. and Doherty, J. (2007). Parameter estimation and uncertainty analysis for a watershed model. *Environmental Modelling & Software*, 22(7) :1000–1020.
- Gandy, C., Smith, J., and Jarvis, A. (2007). Attenuation of mining-derived pollutants in the hyporheic zone : a review. *Science of the Total Environment*, 373(2) :435–446.
- Geuzaine, C. and Remacle, J.-F. (2009). Gmsh : A 3-d finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79(11) :1309–1331.
- Gianni, G., Richon, J., Perrochet, P., Vogel, A., and Brunner, P. (2016). Rapid identification of transience in streambed conductance by inversion of a flood-wave response. *Water Resources Research*, 52(4) :2647–2658.
- Glenz, D. (2013). *Inverse modeling of groundwater flow in the Rhône alluvial aquifer-impact of the Third Rhône correction*. PhD thesis, Université de Neuchâtel.
- Goderniaux, P., Brouyère, S., Fowler, H. J., Blenkinsop, S., Therrien, R., Orban, P., and Dassargues, A. (2009). Large scale surface–subsurface hydrological model to assess climate change impacts on groundwater reserves. *Journal of Hydrology*, 373(1) :122–138.
- Grubb, S. (1993). Analytical model for estimation of steady-state capture zones of pumping wells in confined and unconfined aquifers. *Ground Water*, 31(1) :27–32.
- Gusyev, M., Abrams, D., Toews, M., Morgenstern, U., and Stewart, M. (2014). A comparison of particle-tracking and solute transport methods for simulation of tritium concentrations and groundwater transit times in river water. *Hydrology and Earth System Sciences*, 18(8) :3109–3119.
- Haitjema, H. (2006). The role of hand calculations in ground water flow modeling. *Ground water*, 44(6) :786–791.
- Haitjema, H. (2016). Horizontal flow models that are not. *Groundwater*, 54(5) :613–613.
- Haitjema, H., Kelson, V., and Lange, W. (2001). Selecting modflow cell sizes for accurate flow fields. *Groundwater*, 39(6) :931–938.
- Haitjema, H. M. (1995). *Analytic element modeling of groundwater flow*. Academic Press.
- Harbaugh, A. W. (2005). *MODFLOW-2005, the US Geological Survey modular ground-water model : the ground-water flow process*. US Department of the Interior, US Geological Survey Reston, VA, USA.

- Harvey, J. W. and Wagner, B. J. (2000). Quantifying hydrologic interactions between streams and their subsurface hyporheic zones. Technical report, USGS.
- Hassan, S. T., Lubczynski, M. W., Niswonger, R. G., and Su, Z. (2014). Surface-groundwater interactions in hard rocks in sardon catchment of western spain : An integrated modeling approach. *Journal of Hydrology*, 517 :390–410.
- Herbert, R. (1970). Modelling partially penetrating rivers on aquifer models. *Groundwater*, 8(2) :29–36.
- Hester, E. T. and Doyle, M. W. (2008). In-stream geomorphic structures as drivers of hyporheic exchange. *Water Resources Research*, 44(3) :3417.
- Hill, M., Kavetski, D., Clark, M., Ye, M., Arabi, M., Lu, D., Foglia, L., and Mehl, S. (2016). Practical use of computationally frugal model analysis methods. *Ground water*, 54(2) :159.
- Hill, M. C. and Tiedeman, C. R. (2006). *Effective groundwater model calibration : with analysis of data, sensitivities, predictions, and uncertainty*. John Wiley & Sons.
- Hublart, P., Ruelland, D., Dezetter, A., and Jourde, H. (2015). Reducing structural uncertainty in conceptual hydrological modelling in the semi-arid andes. *Hydrology and Earth System Sciences*, 19(5) :2295–2314.
- Hunt, R. J., Doherty, J., and Tonkin, M. J. (2007). Are models too simple? arguments for increased parameterization. *Ground Water*, 45(3) :254–262.
- Hunt, R. J., Feinstein, D. T., Pint, C. D., and Anderson, M. P. (2006). The importance of diverse data types to calibrate a watershed model of the trout lake basin, northern wisconsin, usa. *Journal of Hydrology*, 321(1) :286–296.
- Hunt, R. J., Haitjema, H. M., Krohelski, J. T., and Feinstein, D. T. (2003). Simulating ground water-lake interactions : Approaches and insights. *Ground Water*, 41(2) :227–237.
- Hvorslev, M. J. (1951). Time lag and soil permeability in ground-water observations. Technical report, DTIC Document.
- INERIS (2014). Données technico-économiques sur les substances chimiques en france : Perchlorate d’ammonium. DRC-13-126866-06964C 71 p., INERIS.
- Irvine, D. J., Brunner, P., Franssen, H.-J. H., and Simmons, C. T. (2012). Heterogeneous or homogeneous? implications of simplifying heterogeneous streambeds in models of losing streams. *Journal of Hydrology*, 424 :16–23.
- Jackson, W. A., Rainwater, K., Anderson, T., Lehman, T., Tock, R., Rajagopalan, S., and Ridley, M. (2004). Distribution and potential sources of perchlorate in the high plains region of texas. Technical report, Texas Commission on Environmental Quality, Austin.

- Jaquet, O., Siegel, P., Klubertanz, G., and Benabderrhamane, H. (2004). Stochastic discrete model of karstic networks. *Advances in Water Resources*, 27(7) :751–760.
- Jon, H. and Usher, W. (2015). Salib sensitivity analysis library in python. Technical report, SALib.
- Kalbus, E., Reinstorf, F., and Schirmer, M. (2006). Measuring methods for groundwater ? surface water interactions : a review. *Hydrology and Earth System Sciences Discussions*, 10(6) :873–887.
- Kasahara, T. and Wondzell, S. M. (2003). Geomorphic controls on hyporheic exchange flow in mountain streams. *Water Resources Research*, 39(1) :1005.
- Keating, E. H., Doherty, J., Vrugt, J. A., and Kang, Q. (2010). Optimization and uncertainty assessment of strongly nonlinear groundwater models with high parameter dimensionality. *Water Resources Research*, 46(10) :W10517.
- Kikuchi, C., Ferre, T. P., and Welker, J. M. (2012). Spatially telescoping measurements for improved characterization of ground water–surface water interactions. *Journal of Hydrology*, 446 :1–12.
- Kimball, B., Runkel, R., and Gerner, L. (2001). Quantification of mine-drainage inflows to little cottonwood creek, utah, using a tracer-injection and synoptic-sampling study. *Environmental Geology*, 40(11-12) :1390–1404.
- Konikow, L. F. (2011). The secret to successful solute-transport modeling. *Ground Water*, 49(2) :144–159.
- Kruseman, G. P., Ridder, N. A., et al. (1990). *Analysis and evaluation of pumping test data*. International Institute for Land Reclamation and Improvement.
- Kurtz, W., Hendricks Franssen, H.-J., Kaiser, H.-P., and Vereecken, H. (2014). Joint assimilation of piezometric heads and groundwater temperatures for improved modeling of river-aquifer interactions. *Water Resources Research*, 50(2) :1665–1688.
- Labarthe, B. (2016). *Quantification des échanges nappe-rivière au sein de l’hydrosystème Seine par modélisation multi échelle*. PhD thesis, Université de recherche Paris Science et Lettres - PSL Research University.
- Lalot, E. (2014). *Analyse des signaux piézométriques et modélisation pour l’évaluation quantitative et la caractérisation des échanges hydrauliques entre aquifères alluviaux et rivières-Application au Rhône*. PhD thesis, Saint-Etienne, EMSE.
- Larocque, M., Banton, O., Ackerer, P., and Razack, M. (1999). Determining karst transmissivities with inverse modeling and an equivalent porous media. *Ground water*, 37(6) :897–903.

- Larroque, F. (2004). *Gestion globale d'un système aquifère complexe*. PhD thesis, Université Michel de Montaigne-Bordeaux III.
- Leaf, A. T., Fienen, M. N., Hunt, R. J., and Buchwald, C. A. (2015). Groundwater/surface-water interactions in the bad river watershed, wisconsin. Technical report, US Geological Survey.
- Ledoux, E., Girard, G., and Villeneuve, J. (1984). Proposition d'un modèle couplé pour la simulation conjointe des écoulements de surface et des écoulements souterrains sur un bassin hydrologique. *La houille blanche*, 39(1-2) :101–120.
- Lee, D. R. (1977). A device for measuring seepage flux in lakes and estuaries1. *Limnology and Oceanography*, 22(1) :140–147.
- Levy, J., Birck, M. D., Mutiti, S., Kilroy, K. C., Windeler, B., Idris, O., and Allen, L. N. (2011). The impact of storm events on a riverbed system and its hydraulic conductivity at a site of induced infiltration. *Journal of environmental management*, 92(8) :1960–1971.
- Loizeau, S. (2013). *Amélioration de la compréhension des fonctionnements hydrodynamiques du champ captant de Crépieux-Charmy*. PhD thesis, Université de Grenoble.
- Loke, M. H. and Barker, R. (1996). Rapid least-squares inversion of apparent resistivity pseudosections by a quasi-newton method. *Geophysical prospecting*, 44(1) :131–152.
- Madsen, H. (2000). Automatic calibration of a conceptual rainfall–runoff model using multiple objectives. *Journal of hydrology*, 235(3) :276–288.
- McCallum, J. L., Cook, P. G., Berhane, D., Rumpf, C., and McMahon, G. A. (2012). Quantifying groundwater flows to streams using differential flow gaugings and water chemistry. *Journal of Hydrology*, 416 :118–132.
- McDonald, M. G. and Harbaugh, A. W. (1988). A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model. Technical report, USGS.
- McNeill, J. (1980). Electromagnetic terrain conductivity measurement at low induction numbers.
- Medina, A. and Carrera, J. (1996). Coupled estimation of flow and solute transport parameters. *Water Resources Research*, 32(10) :3063–3076.
- Mehl, S. and Hill, M. C. (2010). Grid-size dependence of cauchy boundary conditions used to simulate stream–aquifer interactions. *Advances in water resources*, 33(4) :430–442.
- Metropole, B. (2016). Champ captant du thil, un site alliant approvisionnement en eau et préservation de la biodiversité. Technical report, Bordeaux Metropole.

- Monteil, C. (2011). *Estimation de la contribution des principaux aquifères du bassin versant de la Loire au fonctionnement hydrologique du fleuve à l'étiage*. PhD thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Moore, C. and Doherty, J. (2005). Role of the calibration process in reducing model predictive error. *Water Resources Research*, 41(5) :W05020–1.
- Moore, C. and Doherty, J. (2006). The cost of uniqueness in groundwater model calibration. *Advances in Water Resources*, 29(4) :605–623.
- Morel-Seytoux, H. J. (2009). The turning factor in the estimation of stream-aquifer seepage. *Groundwater*, 47(2) :205–212.
- Morel-Seytoux, H. J., Mehl, S., and Morgado, K. (2014). Factors influencing the stream-aquifer flow exchange coefficient. *Groundwater*, 52(5) :775–781.
- Mouhri, A., Flipo, N., Réjiba, F., De Fouquet, C., Bodet, L., Kurtulus, B., Tallec, G., Durand, V., Jost, A., Ansart, P., et al. (2013). Designing a multi-scale sampling system of stream–aquifer interfaces in a sedimentary basin. *Journal of Hydrology*, 504 :194–206.
- Mouhri, A., Flipo, N., and Saleh, F. (2012). État de l'art sur les méthodes de caractérisation et de quantification des échanges nappe-rivière disponible en ligne : [http://www.metis.upmc.fr/piren/?q=webfm\\_send/1040](http://www.metis.upmc.fr/piren/?q=webfm_send/1040). Technical report, PIREN Seine.
- Murdoch, L. C. and Kelly, S. E. (2003). Factors affecting the performance of conventional seepage meters. *Water Resources Research*, 39(6) :SWC2–1.
- Newcomer, M. E., Hubbard, S. S., Fleckenstein, J. H., Maier, U., Schmidt, C., Thullner, M., Ulrich, C., Flipo, N., and Rubin, Y. (2016). Simulating bioclogging effects on dynamic riverbed permeability and infiltration. *Water Resources Research*, 52(4) :2883–2900.
- Nield, S. P., Townley, L. R., and Barr, A. D. (1994). A framework for quantitative analysis of surface water-groundwater interaction : Flow geometry in a vertical section. *Water Resources Research*, 30(8) :2461–2475.
- Niswonger, R. G. and Prudic, D. E. (2005). *Documentation of the streamflow-routing (SFR2) package to include unsaturated flow beneath streams—A modification to SFR1*. US Department of the Interior, US Geological Survey.
- Noorduyn, S. L., Harrington, G. A., and Cook, P. G. (2014). The representative stream length for estimating surface water–groundwater exchange using darcy's law. *Journal of Hydrology*, 513 :353–361.
- Oliver, D. S., Reynolds, A. C., and Liu, N. (2008). *Inverse theory for petroleum reservoir characterization and history matching*. Cambridge University Press.

- Onwunali, J. E. and Durlofsky, L. J. (2010). Application of a particle swarm optimization algorithm for determining optimum well location and type. *Computational Geosciences*, 14(1) :183–198.
- Pappenberger, F. and Beven, K. J. (2006). Ignorance is bliss : Or seven reasons not to use uncertainty analysis. *Water resources research*, 42(5) :10.
- Pebesma, E. J. and Wesseling, C. G. (1998). Gstat : a program for geostatistical modelling, prediction and simulation. *Computers & Geosciences*, 24(1) :17–31.
- Peyrard, D., Sauvage, S., Vervier, P., Sanchez-Perez, J.-M., and Quintard, M. (2008). A coupled vertically integrated model to describe lateral exchanges between surface and subsurface in large alluvial floodplains with a fully penetrating river. *Hydrological Processes*, 22(21) :4257–4273.
- Poeter, E. P. and Hill, M. C. (1997). Inverse models : A necessary next step in ground-water modeling. *Ground water*, 35(2) :250–260.
- Poeter, E. P. and Hill, M. C. (1999). Ucode, a computer code for universal inverse modeling. *Computers & Geosciences*, 25(4) :457–462.
- Pollock, D. W. (1994). *User's Guide for MODPATH/MODPATH-PLOT, Version 3 : A Particle Tracking Post-processing Package for MODFLOW, the US : Geological Survey Finite-difference Ground-water Flow Model*. US Department of Interior.
- Pool, M., Carrera, J., Alcolea, A., and Bocanegra, E. (2015). A comparison of deterministic and stochastic approaches for regional scale inverse modeling on the mar del plata aquifer. *Journal of Hydrology*, 531 :214–229.
- Prickett, T. A. and Lonquist, C. G. (1971). Selected digital computer techniques for groundwater resource evaluation. Technical report, Illinois Water Survey Bull.
- Prudic, D. E., Konikow, L. F., and Banta, E. R. (2004). A new streamflow-routing (sfr1) package to simulate stream-aquifer interaction with modflow-2000. Technical report, USGS.
- Pryet, A., Atteia, O., Delottier, H., and Cousquer, Y. (2015a). Flexible environmental modeling with python and open-gis. In *EGU General Assembly Conference Abstracts*, volume 17, page 9733.
- Pryet, A., Labarthe, B., Saleh, F., Akopian, M., and Flipo, N. (2015b). Reporting of stream-aquifer flow distribution at the regional scale with a distributed process-based model. *Water Resources Management*, 29(1) :139–159.
- QGIS (2012). Qgis geographic information system. open source geospatial foundation project.

- Razavi, S., Tolson, B. A., and Burn, D. H. (2012). Review of surrogate modeling in water resources. *Water Resources Research*, 48(7) :7401.
- Rivière, A., Goncalves, J., Jost, A., and Font, M. (2014). Experimental and numerical assessment of transient stream–aquifer exchange during disconnection. *Journal of Hydrology*, 517 :574–583.
- Rojas, R., Feyen, L., and Dassargues, A. (2008). Conceptual model uncertainty in groundwater modeling : Combining generalized likelihood uncertainty estimation and bayesian model averaging. *Water Resources Research*, 44(12) :W12418.
- Rosenberry, D. O. and LaBaugh, J. W. (2008). Field techniques for estimating water fluxes between surface water and ground water. Technical report, Geological Survey (US).
- Rosenberry, D. O. and Pitlick, J. (2009). Effects of sediment transport and seepage direction on hydraulic properties at the sediment–water interface of hyporheic settings. *Journal of Hydrology*, 373(3) :377–391.
- Rossi, C., Meloni, A., and Tarozzi, N. (2015). Projet de fin d'études, études hydrogéologique et géochimique sur le champ captant du thil. Technical report, ENSEGID.
- Rousseau-Gueutin, P., Love, A., Vasseur, G., Robinson, N., Simmons, C., and Marsily, G. (2013). Time to reach near-steady state in large aquifers. *Water Resources Research*, 49(10) :6893–6908.
- Rushton, K. (2007). Representation in regional models of saturated river–aquifer interaction for gaining/losing rivers. *Journal of Hydrology*, 334(1) :262–281.
- Safege (2009a). Dossier techniques de recueil de données, études ancienne et récente sur la géologie, l'hydrogéologie et sur la qualité des eaux sur le secteur de gamarde. Technical report, SAFEGE.
- Safege (2009b). Etude hydrogéologique du captage de gamarde à saint-médard-en-jalles dans le cadre de la pollution aux hydrocarbures de juin 2009. Technical report, Suez Environnement.
- Safege (2012). Pollution des captages aep de-saint-medard-en-jalles : Resultats de la campagne de prélèvement et du tracage. Technical report, SAFEGE.
- Salamon, P., Fernández-García, D., and Gómez-Hernández, J. J. (2006). A review and numerical assessment of the random walk particle tracking method. *Journal of contaminant hydrology*, 87(3) :277–305.
- Saleh, F., Flipo, N., Habets, F., Ducharne, A., Oudin, L., Viennot, P., and Ledoux, E. (2011). Modeling the impact of in-stream water level fluctuations on stream–aquifer interactions at the regional scale. *Journal of Hydrology*, 400(3) :490–500.

- Saltelli, A., Tarantola, S., Campolongo, F., and Ratto, M. (2004). *Sensitivity analysis in practice : a guide to assessing scientific models*. John Wiley & Sons.
- Scanlon, B. R., Healy, R. W., and Cook, P. G. (2002). Choosing appropriate techniques for quantifying groundwater recharge. *Hydrogeology Journal*, 10(1) :18–39.
- Scanlon, B. R., Mace, R. E., Barrett, M. E., and Smith, B. (2003). Can we simulate regional groundwater flow in a karst system using equivalent porous media models? case study, barton springs edwards aquifer, usa. *Journal of hydrology*, 276(1) :137–158.
- Schmidt, C., Conant, B., Bayer-Raich, M., and Schirmer, M. (2007). Evaluation and field-scale application of an analytical method to quantify groundwater discharge using mapped streambed temperatures. *Journal of Hydrology*, 347(3) :292–307.
- Schwoerbel, J. (1961). Über die lebensbedingungen und die besiedlung des hyporheischen lebensraumes. *Archiv für Hydrobiologie Supplement*, 25 :182–214.
- Seguin (1990). Captage de gamarde rapport d’inspection. Technical report, hydro invest.
- Sepúlveda, N. and Doherty, J. (2015). Uncertainty analysis of a groundwater flow model in east-central florida. *Groundwater*, 53(3) :464–474.
- Sheets, R. A., Hill, M. C., Haitjema, H. M., Provost, A. M., and Masterson, J. P. (2015). Simulation of water-table aquifers using specified saturated thickness. *Groundwater*, 53(1) :151–157.
- Sobol, I. M. (2001). Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their monte carlo estimates. *Mathematics and computers in simulation*, 55(1) :271–280.
- Sophocleous, M. (2002). Interactions between groundwater and surface water : the state of the science. *Hydrogeology journal*, 10(1) :52–67.
- Soulsby, C., Malcolm, I., and Youngson, A. (2001). Hydrochemistry of the hyporheic zone in salmon spawning gravels : a preliminary assessment in a degraded agricultural stream. *Regulated Rivers : Research & Management*, 17(6) :651–665.
- Stonedahl, S. H., Harvey, J. W., Wörman, A., Salehin, M., and Packman, A. I. (2010). A multiscale model for integrating hyporheic exchange from ripples to meanders. *Water Resources Research*, 46(12) :12539.

- Storey, R. G., Howard, K. W., and Williams, D. D. (2003). Factors controlling riffle-scale hyporheic exchange flows and their seasonal changes in a gaining stream : A three-dimensional groundwater flow model. *Water Resources Research*, 39(2) :1034.
- Sulis, M., Meyerhoff, S. B., Paniconi, C., Maxwell, R. M., Putti, M., and Kollet, S. J. (2010). A comparison of two physics-based numerical models for simulating surface water-groundwater interactions. *Advances in Water Resources*, 33(4) :456–467.
- Tarantola, A. (2005). *Inverse problem theory and methods for model parameter estimation*. siam.
- Tauzia, J.-M. (2015). La poudrerie de saint-médard-en-jalles 1660-2010 350 ans d’histoire. Technical report, patrimoine saint medard.
- Tavakoli, R., Yoon, H., Delshad, M., ElSheikh, A. H., Wheeler, M. F., and Arnold, B. W. (2013). Comparison of ensemble filtering algorithms and null-space monte carlo for parameter estimation and uncertainty quantification using co2 sequestration data. *Water Resources Research*, 49(12) :8108–8127.
- Thierion, C., Longuevergne, L., Habets, F., Ledoux, E., Ackerer, P., Majdalani, S., Leblois, E., Lecluse, S., Martin, E., Queguiner, S., et al. (2012). Assessing the water balance of the upper rhine graben hydrosystem. *Journal of Hydrology*, 424 :68–83.
- Tihonov, A. N. (1963). Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method. In *Soviet Math. Dokl*, volume 4, pages 1035–1038.
- Tonina, D. and Buffington, J. M. (2007). Hyporheic exchange in gravel bed rivers with pool-riffle morphology : Laboratory experiments and three-dimensional modeling. *Water Resources Research*, 43(1) :W01421.
- Tonkin, M. and Doherty, J. (2009). Calibration-constrained monte carlo analysis of highly parameterized models using subspace techniques. *Water Resources Research*, 45(12) :B10–1.
- Tonkin, M. J. and Doherty, J. (2005). A hybrid regularized inversion methodology for highly parameterized environmental models. *Water Resources Research*, 41(10) :W10412.
- Tóth, J. (1999). Groundwater as a geologic agent : an overview of the causes, processes, and manifestations. *Hydrogeology journal*, 7(1) :1–14.
- Townley, L. R. (1995). The response of aquifers to periodic forcing. *Advances in Water Resources*, 18(3) :125–146.
- Trumpolt, C. W., Crain, M., Cullison, G. D., Flanagan, S. J., Siegel, L., and Lathrop, S. (2005). Perchlorate : Sources, uses, and occurrences in the environment. *Remediation Journal*, 16(1) :65–89.

- Voss, C. I. (1984). Sutra (saturated-unsaturated transport). a finite-element simulation model for saturated-unsaturated, fluid-density-dependent ground-water flow with energy transport or chemically-reactive single-species solute transport. Technical report, DTIC Document.
- Wang, X., Jardani, A., Jourde, H., Lonergan, L., Cosgrove, J., Gosselin, O., and Massonnat, G. (2016). Characterisation of the transmissivity field of a fractured and karstic aquifer, southern france. *Advances in Water Resources*, 87 :106–121.
- Welter, D. E., Doherty, J. E., Hunt, R. J., Muffels, C. T., Tonkin, M. J., and Schreuder, W. A. (2012). Approaches in highly parameterized inversion : Pest++, a parameter estimation code optimized for large environmental models. Technical report, US Geol Surv Tech Methods, Book.
- Welter, D. E., White, J. T., Hunt, R. J., and Doherty, J. E. (2015). Approaches in highly parameterized inversionest++ version 3, a parameter estimation and uncertainty analysis software suite optimized for large environmental models. Technical report, US Geological Survey.
- White, J. T., Fienen, M. N., and Doherty, J. E. (2016). A python framework for environmental model uncertainty analysis. *Environmental Modelling & Software*, 85 :217–228.
- Winter, T. C. (1995). Recent advances in understanding the interaction of ground-water and surface water. *Reviews of Geophysics*, 33(S2) :985–994.
- Winter, T. C. (1999). Relation of streams, lakes, and wetlands to groundwater flow systems. *Hydrogeology Journal*, 7(1) :28–45.
- Woessner, W. W. (2000). Stream and fluvial plain ground water interactions : rescaling hydrogeologic thought. *Ground Water*, 38(3) :423–429.
- Woodward, S. J., Wöhling, T., and Stenger, R. (2016). Uncertainty in the modelling of spatial and temporal patterns of shallow groundwater flow paths : The role of geological and hydrological site information. *Journal of Hydrology*, 534 :680–694.
- Yapo, P. O., Gupta, H. V., and Sorooshian, S. (1998). Multi-objective global optimization for hydrologic models. *Journal of hydrology*, 204(1) :83–97.
- Yeh, W. W.-G. (1986). Review of parameter identification procedures in ground-water hydrology : The inverse problem. *Water Resources Research*, 22(2) :95–108.
- Yoon, H., Hart, D. B., and McKenna, S. A. (2013). Parameter estimation and predictive uncertainty in stochastic inverse modeling of groundwater flow : Comparing null-space monte carlo and multiple starting point methods. *Water Resources Research*, 49(1) :536–553.

- Zheng, C. (1990). Mt3d, a modular three-dimensional transport model. Technical report, SS Papadopoulos & Associates.
- Zheng, C., Bennett, G. D., et al. (2002). *Applied contaminant transport modeling*, volume 2. Wiley-Interscience New York.
- Zheng, C., Hill, M., Cao, G., and Ma, R. (2012). Mt3dms : Model use, calibration, and validation. *Transactions of the ASABE*, 55(4) :1549–1559.
- Zheng, C. and Wang, P. P. (1999). Mt3dms : a modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems ; documentation and user's guide. Technical report, DTIC Document.
- Zhou, H., Gómez-Hernández, J. J., and Li, L. (2014). Inverse methods in hydrogeology : Evolution and recent trends. *Advances in Water Resources*, 63 :22–37.
- Zlotnik, V. A., Toundykov, D., and Cardenas, M. B. (2015). An analytical approach for flow analysis in aquifers with spatially varying top boundary. *Groundwater*, 53(2) :335–341.

