

Université du Québec
Institut national de la recherche scientifique
Centre Eau Terre Environnement

**MODELISATION DE L'HETEROGENEITE DE L'AQUIFERE
DELTAÏQUE DE VALCARTIER ET SON IMPACT SUR LA
DISPERSIVITE ET L'AGE DE L'EAU SOUTERRAINE**

Par
Emmanuelle Millet

Mémoire présentée pour l'obtention du grade de
Maître ès sciences (M.Sc.)
en sciences de la terre

Jury d'évaluation

Président du jury et
examineur interne

Dr. John Molson
Université Laval

Examineur externe

Dr. Philippe Renard
Université de Neuchâtel

Directeur de recherche

Dr. René Lefebvre
INRS ETE

Codirecteur de recherche

Dr. Erwan Gloaguen
INRS ETE



REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier mon directeur, René Lefebvre, pour m'avoir confié ce travail de recherche, ainsi que pour son aide et les discussions passionnantes que nous avons eues au cours de ces deux ans et demi de maîtrise. Merci aussi, René, pour ta sympathie et ta gaité dans le travail qui auront été une réelle motivation.

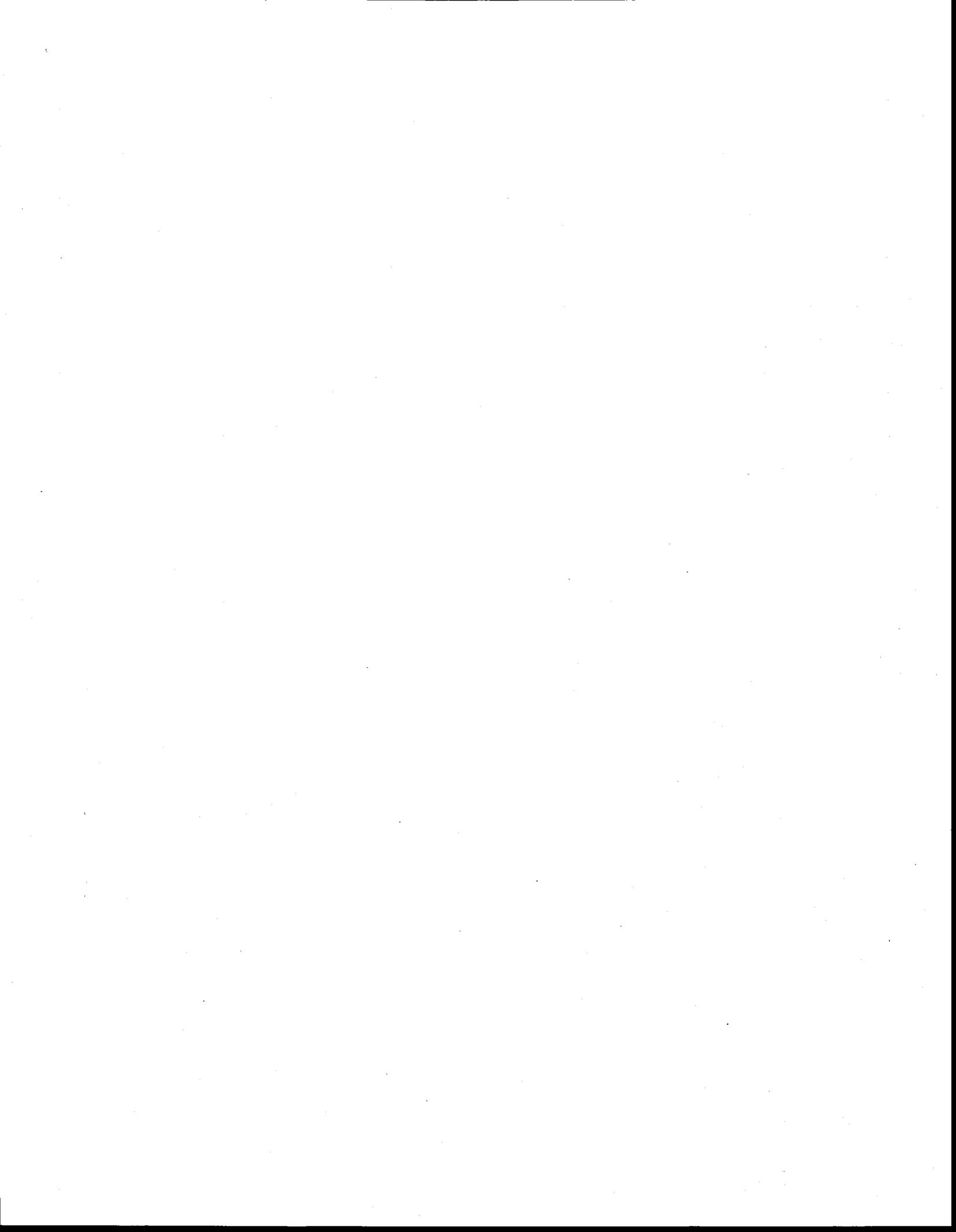
Je remercie également Erwan Gloaguen, co-directeur de ce travail, pour ses idées pertinentes et ses judicieux conseils. Sa patience et sa grande disponibilité lors de mon immersion dans l'univers inconnu des géostatistiques m'ont été d'une aide précieuse.

Merci à tous les membres du jury d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ce travail malgré la charge de travail que j'imagine être la votre.

Ce projet n'aurait pu aboutir sans l'aide et le travail préalable de plusieurs personnes. J'adresse des pensées reconnaissantes à Thomas Ouellon, pour l'ensemble de son travail sur Valcartier qui aura été une vraie source d'inspiration ; à Martin Blouin, pour son soutien dans l'apprentissage des géostatistiques et la modélisation de réservoirs ; à Jean-Marc Ballard qui m'a transmis patiemment son expertise en modélisation hydrogéologique et qui m'a aussi guidée dans le labyrinthe de la base de données ; et enfin à Harold Vigneault pour son soutien informatique face aux problèmes de licence Feflow.

J'ai pu travailler dans un cadre particulièrement agréable, grâce à l'ensemble de mes collègues et amis du 2402 et 2401. Merci à tous pour votre bonne humeur, pour toutes ces séances de rires et de lamentations, et pour toutes ces discussions animées autour d'un café – ou d'une bière !

Mes dernières pensées vont vers ma famille, et surtout mes parents, qui m'ont soutenue dans la poursuite de mes études outre-atlantique !



RÉSUMÉ

L'objectif principal de ce travail était d'étudier l'impact de l'hétérogénéité de la conductivité hydraulique (K) sur la dispersion dans le cas d'un aquifère pro-deltaïque ayant déjà été intensivement caractérisé. En particulier, on se propose ici d'utiliser un estimateur in situ de l'âge de l'eau souterraine comme indicateur de la dispersion. Le présent mémoire est composé de deux chapitres complémentaires. Le premier chapitre présente les principes de la modélisation numérique de l'âge de l'eau souterraine par l'entremise de simulations numériques. Notamment, les effets des différentes conditions qui peuvent être présentes dans des aquifères ont été analysés en fonction des résultats de la modélisation numérique. Le transport d'âge étant influencé par deux grands processus : l'écoulement (advection) et le mélange (dispersion). Les deux ont été testés lors de simulation d'âge (par advection et par advection-dispersion) pour différents modèles d'aquifères 2D verticaux, homogènes ou hétérogènes. Les résultats ont permis de mettre en évidence un effet de la dispersion qui lisse les âges obtenus en réduisant les maximums ; les âges obtenus par advection étant supérieurs à ceux obtenus par advection-dispersion. La modélisation d'âges advectifs-dispersifs, sur plusieurs aquifères synthétiques, a également permis de simuler l'effet de la structure de l'aquifère sur les âges, avec la présence d'hétérogénéité pouvant induire localement un rajeunissement ou un vieillissement des eaux.

La deuxième partie de ce mémoire, sous forme d'article, est une étude sur l'impact de trois niveaux d'hétérogénéité sur la dispersion et la simulation d'âge au sein de l'aquifère deltaïque de Valcartier. Il est reconnu que l'hétérogénéité spatiale de la conductivité hydraulique (K) joue un rôle majeur sur les écoulements et le transport de masse. Cette étude propose de quantifier ces effets sur l'aquifère deltaïc de Valcartier qui s'étend sur 15 km². En raison d'une contamination dissoute de trichloroéthène (TCE), le site a été largement caractérisé et inclus de l'information hydrostratigraphique issus de descriptions de forage (7000 m à 430 localisations). Cette caractérisation inclus également des mesures d'âges isotopiques obtenues avec la méthode tritium-hélium. Les âges observés et simulés ainsi que l'étendu du panache de TCE ont été utilisés, au sein d'un modèle numérique d'écoulement, comme indicateurs des effets dispersifs de différents niveaux d'hétérogénéité. La première partie de cette étude présente la définition des champs de K avec trois niveaux d'hétérogénéité. Un champ de K homogène utilise les valeurs

horizontale (K_h) et verticale (K_v) de K qui fournissent le meilleur calage des charges avec le modèle numérique. Le deuxième niveau d'hétérogénéité est issu des travaux de Ouellon et al. (2008) qui ont krigé les proportions de quatre hydrofaciès (HF) en se basant sur les descriptions de forage et en dérivant les valeurs de K_h et K_v de formules de moyenne généralisée dans un milieu stratifié. Le troisième niveau d'hétérogénéité de K a été obtenu grâce à l'utilisation conjointe de deux méthodes stochastiques. Premièrement, la méthode de simulation multipoints a permis de définir la distribution spatiale des HFs tout en reproduisant les HFs identifiés sur les descriptions de forage mais aussi en se basant sur l'utilisation d'une image d'entraînement, permettant d'intégrer une information sur la distribution spatiale des textures des HFs. Deuxièmement, par le biais des simulations séquentielles Gaussiennes, la distribution spatiale de l'hétérogénéité de K a été générée au sein de chaque HF pour chaque réalisation d'HF. Cette méthodologie a abouti à la création de 60 réalisations de K reproduisant ainsi deux niveaux d'hétérogénéité géologique. Dans la seconde partie de cette étude, l'âge advectif obtenu par traçage de particule a été comparé pour les trois niveaux d'hétérogénéité. Le transport de masse (TCE) et d'âge a également été comparé pour les deux modèles déterministes. Les résultats ont montré que les modèles hétérogènes possédaient des effets dispersifs, même avec un traçage de particule contrôlé par l'advection, induisant une bonne correspondance avec les âges mesurés. De faibles valeurs de dispersivité ont toutefois dûes être utilisées pour le transport de masse de TCE et d'âge pour égaler les mesures et les résultats du traçage de particule. Les modèles hétérogènes ont donc montré une intégration des effets dispersifs causés par l'hétérogénéité du champ de K , permettant ainsi de limiter les effets d'échelle de dispersivité dont souffre les modèles numériques homogènes. Le potentiel de l'âge a également été montré en tant qu'indicateur de la dispersivité transversale, mais ne fournit pas de contrainte sur la dispersivité longitudinale. Globalement, le modèle de K krigé restitue de manière plus adéquate les âges mesurés ainsi que la forme du panache, montrant que les modèles stochastiques tels qu'ils ont été produits pourraient exagérer le niveau d'hétérogénéité des HFs, et donc de K . Cette étude fournit un aperçu sur l'impact que peuvent avoir différentes représentations de l'hétérogénéité d'un aquifère sur la dispersion et le transport de masse (représenté par l'âge et le TCE), et illustre l'utilisation potentielle de l'âge comme indicateur de la dispersion.

ABSTRACT

The main objective of this study was to evaluate the impact of the heterogeneity of hydraulic conductivity (K) on the dispersion effect in a deltaic aquifer. We propose here to use in situ groundwater age as an indicator of the dispersion. This thesis includes two complementary chapters. The first chapter presents the theory of numerical groundwater age modeling. Two methods of age simulations (advective and advective-dispersive age simulations) were compared on different homogeneous or heterogeneous 2D aquifer numerical models. Groundwater age distribution being influenced by two processes: advective and dispersive transport, we analysed the impact of low or high hydraulic conductivity heterogeneity on age distribution. It was also shown how that dispersion smoothes simulated ages by reducing extreme values. Then, advective-dispersive age simulations on different aquifer models also illustrated the impact of aquifer structure on age simulations, causing either locally younger or older ages.

The second chapter is a study on the impact of three heterogeneity levels on dispersion and age simulations of the deltaic Valcartier aquifer. It is recognized that the spatial heterogeneity of hydraulic conductivity (K) plays a major role in groundwater flow and mass transport. This study proposes to quantify these effects at the scale of a 15 km² study area within the unconfined Valcartier deltaic sand aquifer. As a consequence of a dissolved trichloroethene (TCE) plume, the site has been extensively characterized, including hydrostratigraphic information from borehole logs (7000 m logged from 430 locations). The characterization also involved groundwater dating using the tritium-helium method. Observed and simulated groundwater age and the extent of the TCE plume were used as indicators of the dispersive effect of different levels of heterogeneity in a numerical groundwater flow model. The first part of the study involved the definition of K fields with three different levels of heterogeneity. A homogeneous K field used the horizontal (K_h) and vertical (K_v) values of K that provided the best calibration of the numerical model to hydraulic heads. The second level of heterogeneity was taken from Ouillon et al. (2008) who krigged the proportions of four hydrofacies (HF) based on borehole log descriptions and derived K_h and K_v values using generalized means for layered media. The third level of K heterogeneity was obtained from a two-step stochastic modeling process. First, HF distributions were obtained by multiple point geostatistics based on the HF units identified

from borehole logs and a training image providing structural information on the spatial HF distribution. The second step involved the simulation of the K heterogeneity within each HF using sequential Gaussian simulations for each HF simulation obtained in the first step. This procedure lead to the creation of several realizations reproducing the two levels of spatial heterogeneity. In the second part of the study, advective groundwater ages obtained from particle tracking were compared for the models with the three levels of heterogeneity. Mass (TCE) and age transport were also compared for the two deterministic K models. Results show that heterogeneous K models have dispersive effects, even on purely advective particle tracking that matches measured groundwater ages. Quite small dispersivity values had to be used in mass transport of TCE and age to match observations and particle tracking results. Heterogeneous models were thus shown to embed dispersive effects related to their heterogeneous K fields, which may limit dispersivity scale effects plaguing homogeneous numerical models. Groundwater age was also shown to have the potential to be used as a transverse dispersivity indicator, but it did not provide constraints on longitudinal dispersivity. Overall, the kriged K model reproduced observed age data and the shape of the plume more accurately, showing that stochastic simulations in the way they were used may exaggerate the level of HF and K heterogeneity. This work provides insights into how different representations of aquifer heterogeneity can affect dispersion and mass transport (as represented by age and TCE), and it illustrates the potential use of groundwater age as an indicator of dispersion.

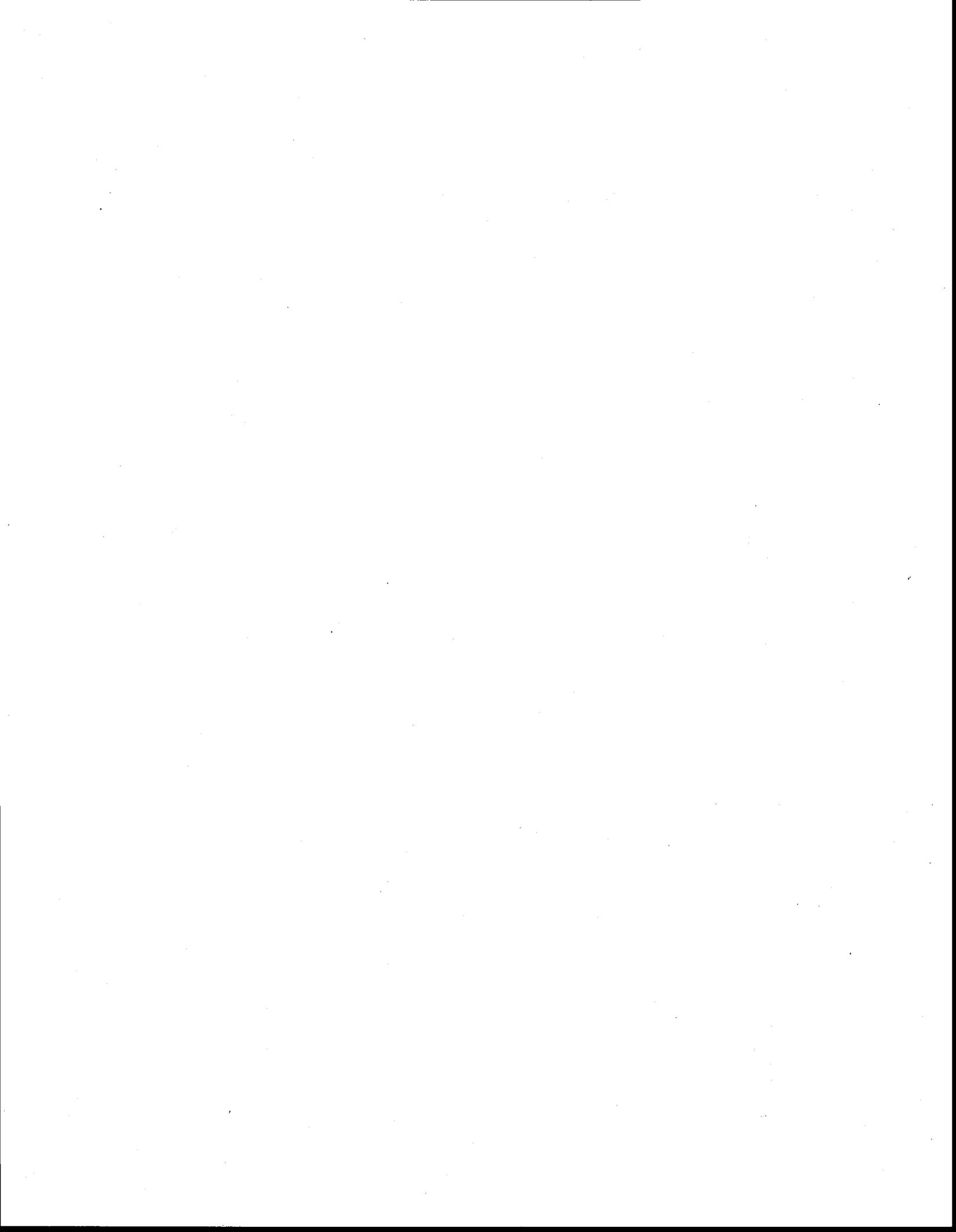
TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS.....	III
RESUME	V
ABSTRACT	VII
1 INTRODUCTION	1
1.1 PROBLEMATIQUE ET OBJECTIFS	1
1.2 METHODOLOGIE GENERALE	3
1.3 DESCRIPTION DU SITE.....	4
2 IMPACTS DE L'HÉTÉROGÉNÉITÉ SUR LA MODÉLISATION 2D DE L'ÂGE DE L'EAU SOUTERRAINE	1
2.1 INTRODUCTION	1
2.2 PRESENTATION DE LA METHODE.....	2
2.2.1 <i>Age advectif</i>	2
2.2.2 <i>Age advectif-dispersif</i>	3
2.3 MODELES CONCEPTUELS	4
2.4 DISCRETISATION.....	5
2.4.1 <i>Aquifères A, B et C</i>	5
2.4.2 <i>Aquifère D</i>	5
2.4.3 <i>Conditions aux limites</i>	6
2.4.4 <i>Modèle d'écoulement (FLONET/TR2)</i>	6
2.4.5 <i>Modèle de transport (TR2)</i>	6
2.5 RESULTATS ET ANALYSE	7
2.5.1 <i>Modèles advectif-dispersif</i>	8
2.5.2 <i>Comparaison des modèles</i>	11
2.6 CONCLUSION.....	14
3 MODELING AQUIFER HETEROGENEITY AND ITS IMPACT ON DISPERSIVITY AND GROUNDWATER AGE IN A DELTAIC SAND AQUIFER.....	15
3.1 ABSTRACT.....	15
3.2 RESUME.....	16
3.3 INTRODUCTION	18
3.4 STUDY AREA.....	21
3.5 METHODS	24
3.5.1 <i>Definition and properties of hydrofacies</i>	24

3.5.2	<i>Construction of the homogeneous model</i>	26
3.5.3	<i>Construction of the kriged model</i>	28
3.5.4	<i>Construction of the nested stochastic models</i>	28
3.6	GROUNDWATER FLOW MODEL DEVELOPMENT.....	33
3.7	EFFECTS OF HETEROGENEITY ON GROUNDWATER FLOW.....	36
3.7.1	<i>Impacts on Heads</i>	36
3.7.2	<i>Impacts on Groundwater Flow</i>	39
3.7.3	<i>Impacts on Kinematic Ages</i>	42
3.7.4	<i>Connectivity Analysis</i>	44
3.8	EFFECTS OF HETEROGENEITY ON MASS TRANSPORT.....	48
3.8.1	<i>Mass transport validation with observed TCE plume</i>	51
3.8.2	<i>Comparison of Isotopic Ages, Kinematic Ages and Mean Age</i>	53
3.9	DISCUSSION.....	57
3.9.1	<i>Applicability of isotopic, advective and advective-dispersive ages</i>	57
3.9.2	<i>Impacts of K heterogeneity on dispersion</i>	60
3.9.3	<i>Groundwater age as a potential indicator of dispersion</i>	60
3.9.4	<i>Conceptual, numerical and stochastic models</i>	62
3.10	CONCLUSIONS.....	63
4	SYNTHÈSE ET CONCLUSIONS GÉNÉRALES	65
4.1	SYNTHESE DES RESULTATS.....	65
4.2	APPLICABILITE DE L'UTILISATION DE L'AGE ISOTOPIQUE, MODELISE PAR ADVECTION, MODELISE PAR ADVECTION-DISPERSION.....	67
4.3	IMPACTS DE L'HETEROGENEITE DE K SUR LA DISPERSION.....	69
4.4	L'AGE, UN INDICATEUR POTENTIEL DE LA DISPERSION.....	69
4.5	MODELE CONCEPTUEL, MODELE NUMERIQUE ET MODELES STOCHASTIQUES.....	70
5	RÉFÉRENCES	73

LISTE DES TABLEAUX

TABLE 2.1	CONDUCTIVITE HYDRAULIQUE ET POROSITE DES AQUIFERES.	5
TABLE 3.1	SUMMARY OF DELTAIC HYDROFACIES PROPERTIES	26
TABLE 3.2	SUMMARY OF VARIOGRAPHY RESULTS FOR K_H FOR EACH HYDROFACIES	32
TABLE 3.3	HYDRAULIC CONDUCTIVITY OF GLACIOMARINE AND DIAMICTON SEDIMENTS USED IN ALL NUMERICAL MODELS	34
TABLE 3.4	FLOW BOUNDARY CONDITIONS FOR ALL THREE NUMERICAL MODELS (OUELLON ET AL. 2010).....	36

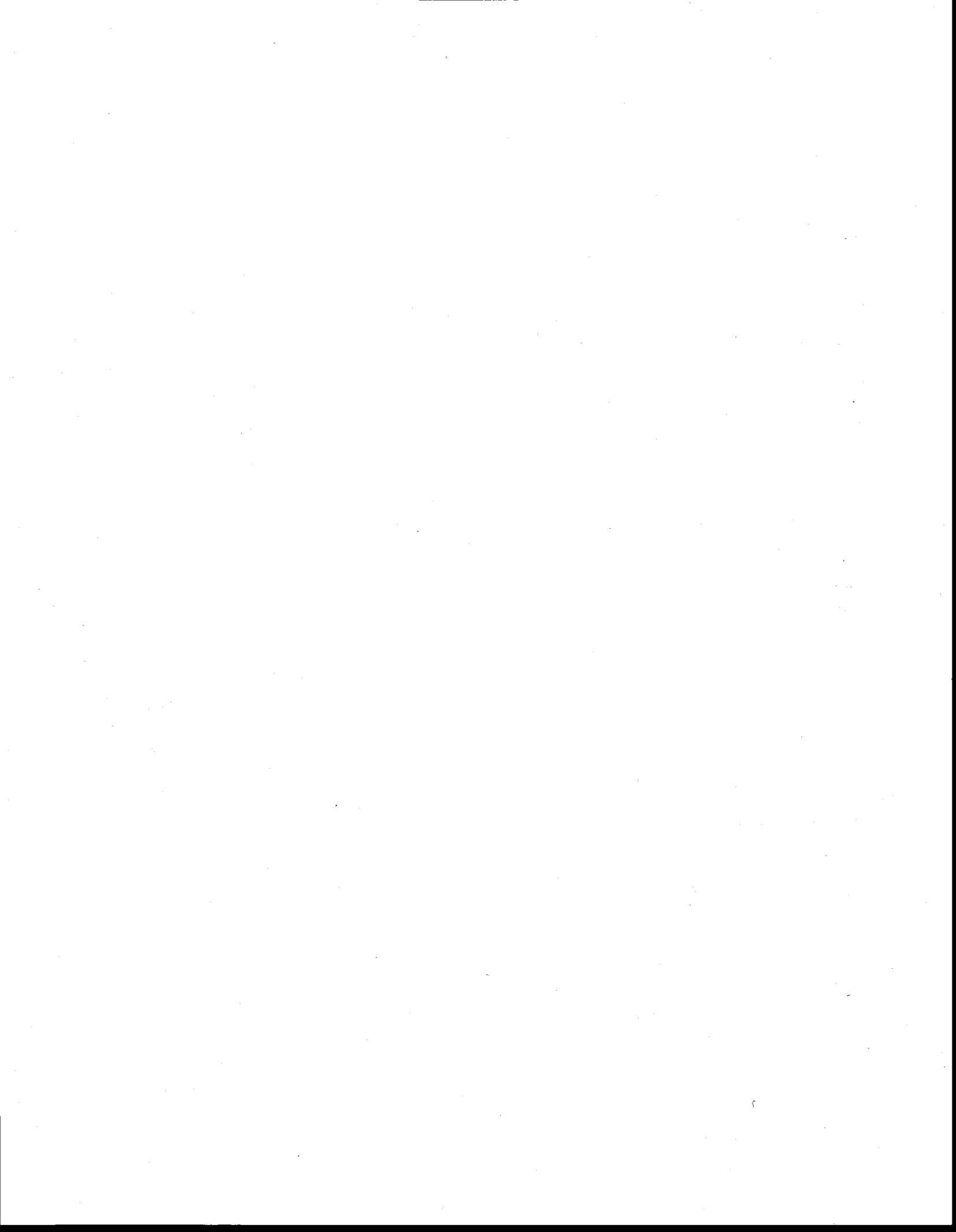


LISTE DES FIGURES

FIGURE 2.1	STREAMTUBES DANS UN MILIEU ISOTROPE (D'APRES MOLSON ET FRIND, 2010).....	3
FIGURE 2.2	REPRESENTATION DU MODELE CONCEPTUEL UTILISE POUR LES AQUIFERES A (SANS LA LENTILLE), B (LENTILLE DE GRAVIER) ET C (LENTILLE DE SILT).....	4
FIGURE 2.3	REPRESENTATION DU MODELE CONCEPTUEL UTILISE POUR L' AQUIFERE D.	5
FIGURE 2.4	RESULTATS DE SIMULATION POUR L' AQUIFERE A. (A) VECTEURS VITESSES. (B) LIGNES D'ECOULEMENT DE LA ZONE DE RECHARGE VERS LA ZONE D'EMERGENCE ET EQUIPOTENTIELLES EN ROUGE. (C) CONTOURS DES AGES ADVECTIFS-DISPERSIFS SIMULES, $A_{MAX}=508$ ANS, $A_L = 5M$, $A_T = 0.05$ M, $D_M = 8,64 \times 10^{-6}$ M ² /S, $K_X=K_Y=10^{-5}$ M/S. 7	7
FIGURE 2.5	RESULTATS DE SIMULATION POUR L' AQUIFERE C. (A) VECTEURS VITESSES. (B) LIGNES D'ECOULEMENT DE LA ZONE DE RECHARGE VERS LA ZONE D'EMERGENCE ET EQUIPOTENTIELLES EN ROUGE. (C) CONTOURS DES AGES ADVECTIFS-DISPERSIFS SIMULES, $A_{MAX}=808$ ANS, $A_L = 5M$, $A_T = 0.05$ M, $D_M = 8,64 \times 10^{-6}$ M ² /S, $K_X=K_Y=10^{-5}$ M/S POUR LES SABLES, $K_X=K_Y=10^{-6}$ M/S POUR LES SILTS.....	7
FIGURE 2.6	RESULTATS DE SIMULATION D' AGE POUR L' AQUIFERE B. (A) VECTEURS VITESSES. (B) LIGNES D'ECOULEMENT DE LA ZONE DE RECHARGE VERS LA ZONE D'EMERGENCE ET EQUIPOTENTIELLES EN ROUGE. (C) CONTOURS DES AGES ADVECTIFS-DISPERSIFS SIMULES, $A_{MAX}=1405$ ANS, $A_L = 5M$, $A_T = 0.05$ M, $D_M = 8,64 \times 10^{-6}$ M ² /S, $K_X=K_Y=10^{-5}$ M/S POUR LES SABLES, $K_X=K_Y=10^{-3}$ M/S POUR LES GRAVIERS.....	8
FIGURE 2.7	RESULTATS DE SIMULATION D' AGE POUR L' AQUIFERE D. (A) VECTEURS VITESSES. (B) LIGNES D'ECOULEMENTS DE LA ZONE DE RECHARGE VERS LA ZONE D'EMERGENCE. (C) CONTOURS DES AGES ADVECTIFS-DISPERSIFS SIMULEES, $A_{MAX}=1440$ ANS, $A_L = 5M$, $A_T = 0.05$ M, $D_M = 8,64 \times 10^{-6}$ M ² /S, $K_X=10^{-4}$ M/S, $K_Y=10^{-8}$ M/S.....	9
FIGURE 2.8	RESULTATS DE SIMULATION D' AGE POUR L' AQUIFERE D. (A) VECTEURS VITESSES. (B) LIGNES D'ECOULEMENTS DE LA ZONE DE RECHARGE VERS LA ZONE D'EMERGENCE. (C) CONTOURS DES AGES ADVECTIFS-DISPERSIFS SIMULES, $A_{MAX}=706$ ANS, $A_L=500M$, $A_T=5$ M, $D_M = 8,64 \times 10^{-6}$ M ² /S, $K_X=10^{-4}$ M/S, $K_Y=10^{-8}$ M/S. 10	10
FIGURE 2.9	(A), (B) ET (C) COMPARAISON DE LA DISTRIBUTION DES AGES ADVECTIFS ET ADVECTIFS-DISPERSIFS EN FONCTION DE LA PROFONDEUR A LA LIMITE DROITE RESPECTIVEMENT POUR LES AQUIFERES A (SABLE), B (SABLE-GRAVIER) ET C (SABLE-SILT). (D) COMPARAISON DES AGES ADVECTIFS-DISPERSIFS DE L' AQUIFERE C, A LA LIMITE DROITE, ET A DEUX TEMPS DIFFERENTS.	12
FIGURE 3.1	STUDY AREA AND SPATIAL DISTRIBUTION OF THE MAIN TYPES OF AVAILABLE DATA (MODIFIED AFTER OUELLON ET AL. 2008).....	22
FIGURE 3.2	HYDROSTRATIGRAPHIC MODEL OF THE VALCARTIER AQUIFER SYSTEM VIEWED FROM THE SOUTHWEST TOWARD THE NORTHEAST (MODIFIED AFTER OUELLON ET AL. 2008). THE MODEL SHOWS HYDROGEOLOGICAL UNITS ABOVE BEDROCK OVER THE NUMERICAL MODEL AREA SHOWN ON FIG. 2.1. THE UPPER LIMIT IS THE WATER TABLE. LOCATIONS (IN ITALIC) OF FEATURES SHOWN IN FIG. 3.1 ARE INDICATED. THIS STUDY CONSIDERS THE DELTAIC AQUIFER AND PRODELTAIC AQUITARD.	23

FIGURE 3.3	BOXPLOTS OF THE DISTRIBUTION OF K MEASUREMENTS FROM SLUG TESTS ASSIGNED TO DELTAIC HYDROFACIES (AFTER OUELLON ET AL. 2008). THE BASE, CENTER LINE AND TOP OF THE BOX CORRESPOND, RESPECTIVELY, TO THE 25 TH PERCENTILE, THE MEDIAN AND 75 TH PERCENTILE, WHEREAS STARS IDENTIFY OUTLIERS. THE NUMBER OF DATA POINTS (N) IS INDICATED ON TOP OF THE GRAPH.....	25
FIGURE 3.4	COMPARISON OF OBSERVED RELATIVE HEADS (W.R.T. THE AQUIFER BASE) IN THE REGIONAL DELTAIC AQUIFER WITH THE ANALYTICAL SOLUTION OF CHESNAUX ET AL. (2005). THE ANALYTICAL SOLUTION USED A $\text{LOG}K_H$ OF -3.6 (K_H IN M/S) AND A RECHARGE OF 300 MM/Y (MODIFIED AFTER LEFEBVRE 2010).....	27
FIGURE 3.5	WORKFLOW (AFTER BLOUIN ET AL. 2012) USED FOR THE DEVELOPMENT OF STOCHASTIC HETEROGENEITY MODELS : (A) HYDROFACIES DATA FROM BOREHOLE LOGS AND TRAINING IMAGE BASED ON HIGHEST PROPORTION HYDROFACIES INTERPOLATED BY KRIGING (FROM OUELLON ET AL. 2008), (B) EXAMPLE OF A REALIZATION FROM MULTIPPOINT GEOSTATISTICAL (MPG) MODELING, (C) EXAMPLES OF MULTIPLE REALIZATIONS OF K VALUES FOR THE HF BY SEQUENTIAL GAUSSIAN SIMULATION (SGS) FOR A GIVEN MPG REALIZATION.....	29
FIGURE 3.6	NUMERICAL GRID : (A) PLAN VIEW OF THE GRID AND BOUNDARY CONDITIONS, AND (B) SECTION VIEW OF MODEL LAYERS CLOSELY FOLLOWING THE LIMITS OF GEOLOGICAL UNITS, WITH NUMBERS REFERING TO THE INTERPOLATED SURFACES BETWEEN UNITS THAT WERE USED TO GUIDE THE ASSIGNMENT OF MODEL LAYERS (1: TOP OF BEDROCK; 2: TOP OF DIAMICTON AQUIFER; 3: TOP OF GLACIOMARINE AQUITARD; 4: BASE OF PRODELTAIC AQUITARD; 5: TOP OF PRODELTAIC AQUITARD; 6: WATER TABLE (AFTER OUELLON ET AL. 2010).....	35
FIGURE 3.7	OBSERVED HEADS FROM PIEZOMETRIC MEASUREMENTS VERSUS SIMULATED HEADS AND ROOT MEAN SQUARE ERROR (RMSE) FOR (A) THE HOMOGENEOUS MODEL, (B) THE KRIGED HETEROGENEOUS MODEL AND (C) ONE REALIZATION OF A STOCHASTIC HETEROGENEOUS MODEL.....	37
FIGURE 3.8	ROOT MEAN SQUARE ERROR (M) BETWEEN OBSERVED AND SIMULATED HEADS FOR ALL NUMERICAL HETEROGENEITY MODELS.....	38
FIGURE 3.9	OBSERVED WATER TABLE OF THE UNCONFINED DELTAIC AQUIFER (FROM OUELLON ET AL., 2010).....	39
FIGURE 3.10	SIMULATED WATER TABLE FOR THE (A) HOMOGENEOUS MODEL, (B) THE KRIGED HETEROGENEOUS MODEL, AND (C) ONE OF THE STOCHASTIC HETEROGENEOUS MODELS.....	41
FIGURE 3.11	SPATIAL DISTRIBUTION OF K_H (LEFT) AND ADVECTIVE GROUNDWATER AGES OBTAINED FROM PARTICLE TRACKING (RIGHT) FOR (A) THE HOMOGENEOUS AND (B) HETEROGENEOUS MODELS AND (C) ONE REALIZATION OF K . THE FIGURES REPRESENT VERTICAL CROSS-SECTIONS ORIENTED WEST TO EAST ALONG THE NORTH FLOW PATH.....	43
FIGURE 3.12	CONNECTED PERCENTAGE (USING GRID FACE CONNECTION) OF THE DELTATIC AQUIFER WITH $K_H > 10^{-3}$ M/S FOR THE 60 STOCHASTIC REALIZATIONS AND FOR THE KRIGED K MODEL. REALIZATIONS 1 AND 2 ARE REPRESENTED IN THE FIGURE 3.12.....	45
FIGURE 3.13	REPRESENTATION OF THE CONNECTED VOLUMES (OR GEOBODIES) OF THE DELTAIC AQUIFER USING FACE CONNECTION OF THE SIMULATION GRID. COLORS REPRESENT DIFFERENT GEOBODIE VOLUMES. RED REPRESENTS THE HIGHEST GEOBODY VOLUME FOR (A) THE KRIGED K MODEL, (B) THE REALIZATION 1 AND (C)	

	THE REALIZATION 2 - RESPECTIVELY THE SMALLEST (18%) AND THE HIGHEST (29%) CONNECTED PERCENTAGE OF THE DELTAIC AQUIFER. THE YELLOW SURFACE REPRESENTS THE BOTTOM OF THE DELTAIC AQUIFER.	47
FIGURE 3.14	OBSERVED TCE PLUME (A) VERSUS SIMULATED PLUME FOR (B) THE HOMOGENEOUS MODEL AND (C) THE HETEROGENEOUS KRIGED MODEL. MASS MIGRATES TO THE EAST IN THE HOMOGENEOUS MODEL BECAUSE IT DID NOT REPRODUCE WELL THE LOCATION OF THE GROUNDWATER FLOW DIVIDE.	52
FIGURE 3.15	LOCATION OF OBSERVATION WELLS ON THE NORTH AND THE SOUTH FLOW PATH USED BY MURPHY ET AL. (2011) TO CHARACTERIZE TRITIUM-HELIUM GROUNDWATER AGE. THE FLOW PATHS ARE SHOWN OVER THE SIMULATED WATER TABLE USING THE HETEROGENEOUS KRIGED MODEL.	54
FIGURE 3.16	(A), (B), (C), AND (D) COMPARAISON OF ADVECTIVE (FROM PARTICULE TRACKING), ADVECTIVE-DISPERSIVE AND ISOTOPIC AGES VERSUS DEPTH, FOR THE HOMOGENEOUS AND THE KRIGED MODEL, ALONG THE NORTH FLOW PATH (WELL LOCATIONS SHOWN ON FIGURE 3.15). DISPERSIVITIES ARE $A_L=10$ M AND $A_T=0.001$ M. PURPLE LINES REPRESENT AGES FOR STEADY UNIFORM VERTICAL RECHARGE OF 300 MM/Y AND FOR A POROSITY OF 0.35. BLACK LINES REPRESENT THE INTERVAL OF GLACIOMARINE SEDIMENTS BELOW THE DELTAIC AQUIFER..	56
FIGURE 3.17	(A), (B), (C), (D) AND (E) COMPARAISON OF ADVECTIVE (FROM PARTICULE TRACKING), ADVECTIVE-DISPERSIVE AND ISOTOPIC AGES VERSUS DEPTH, FOR THE HOMOGENEOUS AND THE KRIGED MODEL, ALONG THE SOUTH FLOW PATH (WELL LOCATIONS SHOWN ON FIGURE 3.15). DISPERSIVITIES ARE $A_L=10$ M AND $A_T=0.001$ M. PURPLE LINES REPRESENT AGES FOR STEADY UNIFORM VERTICAL RECHARGE OF 300 MM/Y AND FOR A POROSITY OF 0.35. BLACK LINES REPRESENT THE INTERVAL OF GLACIOMARINE SEDIMENTS BELOW THE DELTAIC AQUIFER..	56



LISTE DES ABRÉVIATIONS

A	Âge
A_{max}	Âge maximal simulé
α	Dispersivité (longitudinale et transversale)
α_L	Dispersivité longitudinale
α_T	Dispersivité transversale (horizontale et verticale, ici $\alpha_{TH} = \alpha_{TV}$)
$b(s)$	Distance entre les streamlines
$d(s)$	Distance le long d'une streamline
$d(t)$	Durée mis par une particule pour parcourir une distance ds
D	Tenseur de dispersion hydrodynamique
D^*	Diffusion moléculaire
D_m	Dispersion mécanique
Δx	Discretisation numérique selon la direction x
Δy	Discretisation numérique selon la direction y
Δz	Discretisation numérique selon la direction z
${}^3H-{}^3He$	Tritium-hélium
HF	Hydrofaciès
K	Conductivité hydraulique
L_s	Longueur du chemin d'écoulement
MPG	Multiple Point Geostatistics ou statistiques multipoints
Pe	Nombre de Péclet
ψ	Streamfunction
$\Delta\psi$	Intervalle entre deux streamfuncions
$q(s)$	Flux de décharge spécifique (ou flux de Darcy)

ΔQ	Décharge totale entre deux streamfunctions
$RMSE$	Root mean square error ou erreur quadratique
SGS	Sequential Gaussian Simulation ou simulations séquentielles gaussiennes
t	Time
Δt	Discretisation numérique temporelle
TCE	Trichloroéthylène
TI	Training Image ou image d'apprentissage
θ	Porosité
v	Vitesse
$v(s)$	Vitesse de pore

1 INTRODUCTION

1.1 Problématique et objectifs

L'utilité de la modélisation numérique en hydrogéologie n'est plus à démontrer tant ses applications sont nombreuses. Mais pour aider à la compréhension des écoulements ou du transport d'un système aquifère, un des défis actuels reste la représentation de l'hétérogénéité spatiale – et plus particulièrement la représentation des différents niveaux d'hétérogénéités – que sont les hydrofaciès (HF) et la conductivité hydraulique (K) (De Marsily et al., 2005). C'est en effet une préoccupation majeure, tant pour la caractérisation de la ressource en eau que pour l'étude de sites contaminés (Barry, 1993). Depuis quelques années, inspiré par les récents développements en caractérisation des réservoirs pétroliers (Chambers et al., 2000), un changement de paradigme en hydrogéologie a vu le jour avec la volonté de passer d'un modèle déterministe de l'hétérogénéité de l'aquifère à un ensemble de modèles équiprobables représentatifs de la variabilité potentielle du milieu (Sudicky 1986, Graham 1991, Kabala 1991, Frei 2009). Cette approche, basée sur l'utilisation des géostatistiques, permet de modéliser l'incertitude associée, d'une part, à la distribution spatiale des propriétés de l'aquifère, et d'autre part, à la sporadicité des données (Doyen, 2007). Il existe de nombreux algorithmes pour la simulation de données catégoriques ou continues comme les HF ou K . Ces méthodes permettent la construction rapide de modèles d'hétérogénéité équiprobables.

Afin de tester les modèles hétérogènes d'HF ou de K , une des difficultés est de pouvoir utiliser des données qui intègrent les différents niveaux d'hétérogénéité du champ de K testé. En effet, il est reconnu que les variations du champ de K à grandes échelles jouent un rôle majeur sur les écoulements (modifiant ainsi la piézométrie ou les charges) alors que les variations de K à petites échelles influencent plus particulièrement le transport de matière dissoute en jouant sur la dispersion. Plus particulièrement, l'étude de la dispersion d'un modèle revêt une grande importance du point de vue de la contamination car elle tendra à augmenter la taille du panache (Adams et Gelhar, 1992) en diminuant les forts gradients. La compréhension des impacts de la dispersion sont cruciaux afin de gérer efficacement la ressource en eau.

En modélisation hydrogéologique, l'ajustement des paramètres de dispersion reste un défi : en effet, la dispersivité utilisée dans les modèles est dépendante des dimensions du modèle ou de l'échelle d'observation (Fried, 1975; Barry, 1993; Gehlar 1986; Schulze-Makuch, 2005). Dans des cas complexes, ces paramètres peuvent être difficiles à ajuster. En prenant pour hypothèse qu'une distribution spatiale de K suffisamment précise permettrait la création de modèles intrinsèquement dispersifs, il serait alors possible de se dédouaner totalement ou partiellement de l'ajustement ad hoc de la dispersivité. A Valcartier, en raison du grand nombre de données, il est possible d'obtenir des modèles robustes géostatistiques, dans le sens où la représentation de l'hétérogénéité est suffisamment contrainte pour produire une bonne modélisation des statistiques spatiales (Kolterman et Gorelick, 1996). De plus, grâce à des relevés de terrain nombreux et variés, il est possible de valider les différents modèles hétérogènes de K pour l'écoulement et le transport de masse.

L'objectif de cette étude est de comparer les effets dispersifs de trois modèles de K ayant chacun un niveau d'hétérogénéité différent : un modèle de K homogène, un modèle de K krigé et un modèle de K dont la construction est basée sur l'utilisation conjointe de deux méthodes géostatistiques. Afin d'étudier ces effets dispersifs, la modélisation d'âge a été principalement utilisée selon deux méthodes de simulation :

- le transport d'âge par traçage de particule (advection) qui permet également de visualiser, par l'observation des trajectoires des particules, les bouleversements potentiels des patrons d'écoulement.
- le transport d'âge selon la méthode de Goode (advection + dispersion) qui permet de rendre compte, de façon plus réaliste, des effets de mélange générés par l'hétérogénéité.

Ces travaux apportent donc une contribution originale à l'application de données d'âge dans un contexte où son potentiel commence à être investigué (Engdahl et al., 2013).

Cette étude a également permis de faire le lien entre le développement d'une méthodologie (création de champs d'hétérogénéité par des méthodes stochastiques) et l'application concrète à un site de dimensions réelles (superficie de plus de 30 km²). Ce site est, de plus, favorable à la modélisation de phénomènes en transport (en particulier de transport d'âge) car il est soumis à peu d'effets dispersifs complexes qui résulteraient d'un important mélange : faible présence de

matrice silteuse, régularité des courbes d'entrée du tritium, géométrie en « V » de l'aquifère, et une forte connectivité.

1.2 Méthodologie générale

Afin d'étudier l'impact de l'hétérogénéité de K sur la dispersion, on se propose ici de tester l'utilisation particulière de l'âge de l'eau comme indicateur de la dispersion. Pour cela, dans un premier chapitre, des modèles synthétiques d'aquifères 2D verticaux, de géométries simples, ont été utilisés pour la simulation d'âge. L'hétérogénéité y est représentée par la présence d'une lentille de graviers ou de silts, dans un modèle sableux homogène. La distribution des âges est aussi observée pour un cas d'aquifère un peu plus complexe qui présente une condition de « nappe Tothienne » et une forte anisotropie. Parallèlement, les effets de deux méthodes de simulation d'âge – advectif et advectif-dispersif – sont comparés le long de deux profils d'âge extraits à l'exutoire.

Dans le deuxième chapitre, afin de réaliser une étude comparative des effets dispersifs de l'hétérogénéité, basée cette fois sur le cas réel de l'aquifère de Valcartier, trois modèles représentant trois niveaux d'hétérogénéité de K ont été construits :

- un modèle de K homogène,
- un modèle de K krigé (issus des travaux de Ouillon, 2008),
- et plusieurs modèles de K stochastiques utilisant une méthodologie en deux étapes présentée par Blouin et al., (2012).

Le modèle homogène est représentatif à la fois des variations hydrostratigraphiques majeures à grande échelle et de contacts francs entre les zones de K . Le modèle krigé montre une reproduction plus juste de l'hétérogénéité de K basée sur la distribution des données mais ne présentant pas de structure spatiale particulière et lisse les contrastes entre les différents HF. Le dernier modèle testé utilise deux méthodes imbriquées pour restituer à la fois une structure spatiale représentative par le biais des simulations multi-points (Guardiano and Strivastava, 1993; Strebelle and Journel 2000; Caers, 2002) et une hétérogénéité à plus petite échelle via les SGS (Deutsch and Journel, 1992; Koltermann and Gorelick, 1996; Goovaerts, 1997). Cette

méthodologie permet ainsi la restitution de deux niveaux d'hétérogénéité spatiale de la géologie à l'origine de la dispersion à petite et grande échelle.

Dans un second temps, suivant le processus traditionnel de modélisation hydrogéologique, ces modèles ont été testés dans le simulateur d'écoulement et de transport FEFLOW (WASY, 2005). Premièrement, l'impact des différents modèles de K sur les charges, la piézométrie ainsi que le tracage de particule a été observé. Deuxièmement, concernant la modélisation du transport de masse, deux types de données sont utilisées : des données classiques de contamination liées à un panache de TCE; et des données moins classiques d'âges isotopiques (mesurés avec la méthode tritium/hélium). En effet, comme le souligne Cornaton (2004) l'âge est une propriété de l'aquifère transportée par advection mais aussi par dispersion. En utilisant l'approche de Goode (1996), la modélisation d'âge est donc également testée pour quantifier l'impact dispersif des champs de K .

1.3 Description du site

Cette section, portant sur la description du site d'étude, est extraite du rapport de synthèse du contexte hydrogéologique de Valcartier (Ouillon et al., 2010).

Le secteur Valcartier est situé à environ 30 km au nord du centre-ville de Québec (Planche 1.1). Deux entités administratives du Ministère de la Défense Nationale (MDN) se partagent le territoire fédéral : la Garnison Valcartier et le centre R&D pour la Défense Canada Valcartier (RDDC Valcartier). Un site industriel désaffecté appartenant à SNC-Lavalin se trouve au sud du secteur. Cet ancien site de production de munitions faisait partie de la filiale SNC-TEC de SNC-Lavalin. En janvier 2007, SNC-Lavalin a vendu cette filiale à General Dynamics mais la terrain est toutefois demeuré la propriété de SNC-Lavalin. Deux municipalités bordent le site, soit la Ville de Québec à l'est (arrondissement 8 comprenant l'ancienne ville de Val-Bélair) et Shannon à l'ouest.

Le secteur Valcartier est relativement plat à l'exception des monts Rolland-Auger, au sud, et Brillant, à l'est. Dans l'est, la vallée de Val-Bélair est encaissée entre ces deux monts. La région à l'étude recoupe deux bassins versants. L'ouest du secteur occupe le bassin versant de la rivière Jacques-Cartier. La vallée de cette rivière borde l'ouest du site et la rivière s'écoule du nord vers

le sud. L'est du secteur se trouve pour sa part dans le bassin versant de la rivière Nelson. Le ruisseau Savard, un affluent de la rivière Nelson, est également présent dans l'est du site. Ces deux cours d'eau s'écoulent respectivement du nord et du sud en direction du centre de la vallée Val-Bélair, puis bifurquent ensuite à l'est vers la vallée de Val-Bélair.

Une vallée dans le roc, en forme de croissant et d'orientation générale est-ouest, est présente sous le site. Cette vallée est enfouie sous des sédiments dont l'épaisseur peut localement atteindre 50 m. Les unités stratigraphiques identifiées dans le système aquifère de Valcartier sont, du roc à la surface : le till, les sables et graviers proglaciaires, le silt glaciomarin et les sables et graviers deltaïques, à travers lesquels sont insérés les sables fins et silts prodeltaïques. Les sables et graviers deltaïques et les sables fins et silts prodeltaïques forment ensemble le système deltaïque. Par son volume et ses propriétés hydrauliques, le système deltaïque est l'aquifère principal du secteur Valcartier. Les tills et les sédiments proglaciaires sont deux unités graveleuses et hétérogènes qui peuvent être difficiles à distinguer visuellement lors de travaux de forage. Pour cette raison, ces unités n'ont pas toujours été distinguées. Elles sont donc regroupées et forment ensemble les diamictons, le deuxième aquifère du système. La Garnison Valcartier tire son eau potable de puits s'alimentant dans les sables et graviers deltaïques, tandis que les puits de captage de la Ville de Québec puisent à la fois dans les sables et graviers deltaïques et les diamictons.



2 IMPACTS DE L'HÉTÉROGÉNÉITÉ SUR LA MODÉLISATION 2D DE L'ÂGE DE L'EAU SOUTERRAINE

2.1 Introduction

L'utilité de la datation de l'eau souterraine en hydrogéologie n'est plus à démontrer tant ses applications sont nombreuses. Par exemple, dans le cadre de la modélisation, dater les eaux souterraines peut servir à estimer la recharge des aquifères (Solomon & Cook, 1994) et peut être un outil efficace pour le calage du modèle (Sanford, 2011). Ce chapitre du mémoire a pour but de présenter les principes de la modélisation numérique de l'âge de l'eau souterraine par l'entremise de simulations qui démontrent l'effet de différentes conditions qui peuvent être présentes dans des aquifères sur les résultats de la modélisation. Le transport d'âge est influencé par deux grands processus : l'écoulement (advection) et le mélange (dispersion). En utilisant plusieurs schémas 2D d'aquifères simples, on cherche ainsi surtout à étudier l'effet de la dispersion sur la simulation d'âges en comparant les résultats à un modèle où seul l'âge advectif est simulé. Parallèlement, l'âge advectif-dispersif sera simulé dans un modèle d'aquifère un peu plus complexe qui présente deux dimensions d'écoulements – locales et régionales – et une anisotropie importante. Ces principes et les résultats des simulations dans les cas simples présentés dans le présent chapitre vont servir de base à l'interprétation des conditions plus complexes rencontrées dans le système aquifère réel de Valcartier qui a été l'objet principal des travaux de recherche.

Dans une première partie, un aperçu des méthodes utilisées pour les deux types de modélisation sera présenté. Puis, les modèles conceptuels des aquifères ainsi que la discrétisation associée seront détaillés. Enfin, après avoir exposé le choix des conditions aux limites pour les modèles d'écoulement et de transport, nous commenterons les résultats.

2.2 Présentation de la méthode

L'objectif de ce travail est de comparer deux méthodes de simulation de l'âge de l'eau souterraine, l'une utilisant l'âge advectif basée sur les lignes de courant, et l'autre sur l'âge advectif-dispersif utilisant l'équation d'advection-dispersion. La modélisation numérique de l'âge advectif se fera à l'aide du logiciel FLONET (Molson et Frind, 2010), et la modélisation du transport advectif-dispersif de l'âge utilisera le module TR2 au sein du domaine d'écoulement de FLONET/TR2.

2.2.1 Age advectif

La simulation d'âge advectif par les modèles FLONET/TR2 est en partie basée sur le calcul de la vitesse entre deux lignes d'écoulement (*streamlines*). Comme le présentent Molson et Frind (2004) dans le guide d'utilisateur FLONET/TR2, le débit total par mètre de largeur ΔQ (m^2/s) entre deux *streamlines* définies par les deux *streamfunctions* ψ_1 et ψ_2 est égale à l'intervalle $\Delta\psi$ entre ces deux *streamfunctions* :

$$\Delta Q = \Delta\psi$$

On peut alors définir le flux (débit spécifique) $q(s)$ ($\text{m}^3/\text{m}^2 \cdot \text{s}$ ou m/s) dans le tube de courant (*streamtube*) comme suit :

$$q(s) = \frac{\Delta Q}{b(s)} = \frac{\Delta\psi}{b(s)}$$

avec $b(s)$ = distance entre les *streamlines* (m)

La vitesse de pore $v(s)$ (m/s) peut être définie par le flux $q(s)$ divisé par la porosité θ (-) :

$$v(s) = \frac{q(s)}{\theta} = \frac{\Delta\psi}{\theta b(s)}$$

La durée dt (s) mise par une particule pour parcourir une distance ds (m) le long d'une *streamline* est :

$$dt = \frac{ds}{v(s)} = \frac{\theta b(s)}{\Delta\psi} \cdot ds$$

Par intégration, on obtient le temps t (s) de parcours d'une particule entre deux *streamfunctions* :

$$t = \int_t dt = \frac{\theta}{\Delta\psi} \int_s b(s) ds$$

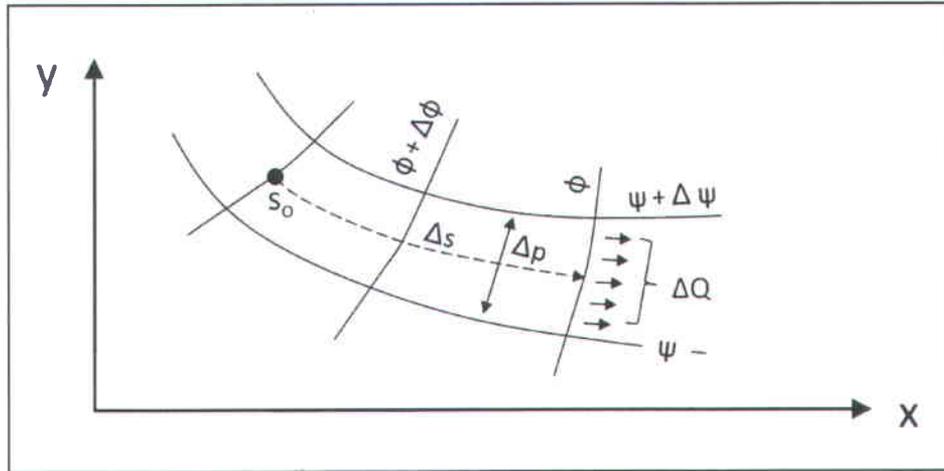


Figure 2.1 Streamtubes dans un milieu isotrope (d'après Molson et Frind, 2010).

2.2.2 Age advectif-dispersif

La théorie utilisée ici pour simuler le transport d'âge des eaux souterraines a été présentée par Goode (1996). Pour un aquifère en régime permanent, en définissant l'âge comme la moyenne pondérée des masses d'eau, une analogie entre le transport d'un traceur et le transport d'âge peut être faite. Par la suite, en substituant dans l'équation de transport d'advection-dispersion, la concentration par l'âge moyen, on peut relier directement les effets de la dispersion hydrodynamique sur le transport de masse d'âge :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial A}{\partial x_j} \right) - v_i \frac{\partial A}{\partial x_i} + 1 = 0$$

Avec A : âge moyen (T); D : tenseur de dispersion hydrodynamique (L^2/T); v : vitesse (L/T); 1 : incrément permettant de simuler le vieillissement des masses d'âge d'une unité

de temps par pas de temps d'une unité de temps. Cette définition permet donc de considérer l'occurrence des mélanges d'âges d'eau dans l'aquifère.

2.3 Modèles conceptuels

Pour les simulations numériques, on considère quatre modèles conceptuels d'aquifères libres différents A, B, C et D contenant des matériaux de conductivité hydraulique (K) distinctes, le silt, le sable et le gravier en ordre croissant de K :

- A- Sable : un aquifère sableux homogène,
- B- Sable-gravier : un aquifère sableux homogène comprenant une lentille de gravier homogène de 10 m d'épaisseur et 100 m de largeur.
- C- Sable-silt : un aquifère sableux homogène comprenant une lentille de silt de 10 m d'épaisseur et 100 m de largeur.
- D- Bangladesh : un modèle conceptuel illustrant de façon très simplifiée le cas d'un aquifère régional au Bangladesh (assimilé à des schistes) possédant un facteur d'anisotropie important et dont la nappe est simulée de façon à représenter les variations topographiques, ce qui représente des petits exutoires locaux comme des ruisseaux ou des drains.

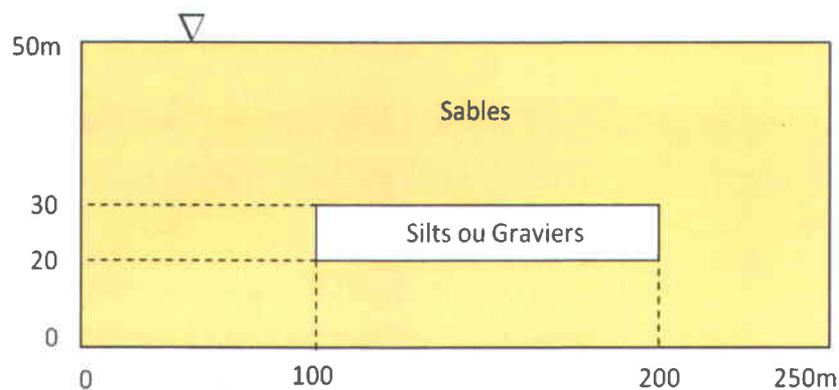


Figure 2.2 Représentation du modèle conceptuel utilisé pour les aquifères A (sans la lentille), B (lentille de gravier) et C (lentille de silt).

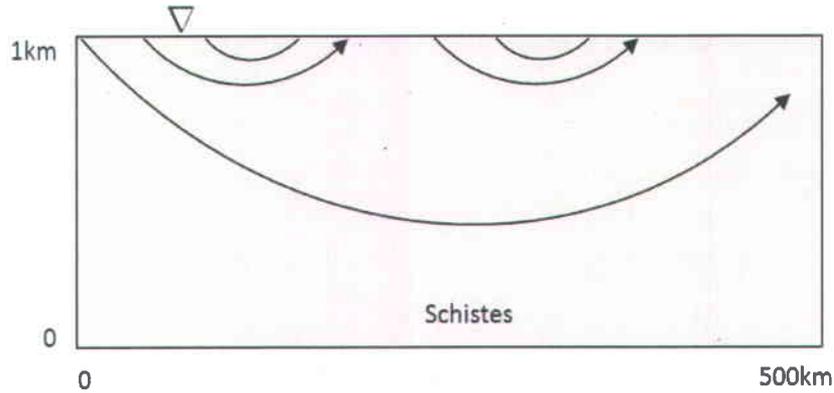


Figure 2.3 Représentation du modèle conceptuel utilisé pour l'aquifère D.

Le tableau ci-dessous récapitule la conductivité hydraulique (horizontale K_x et verticale K_y) et la porosité θ des sables, silts, graviers et schistes des aquifères A, B, C et D.

Table 2.1 Conductivité hydraulique et porosité des aquifères.

	Silts	Sables	Graviers	Schistes
K_x (m/s)	10^{-5}	10^{-6}	10^{-3}	10^{-4}
K_y (m/s)	10^{-5}	10^{-6}	10^{-3}	10^{-8}
θ	0.3	0.3	0.3	0.2

2.4 Discrétisation

2.4.1 Aquifères A, B et C

Les dimensions des aquifères A, B et C sont de 50 m de hauteur par 250 m de longueur. Pour les modèles d'écoulement et de transport on utilise le même maillage carré de 1m de côté, le nombre de nœuds est donc de 251 par 51 (x, y).

2.4.2 Aquifère D

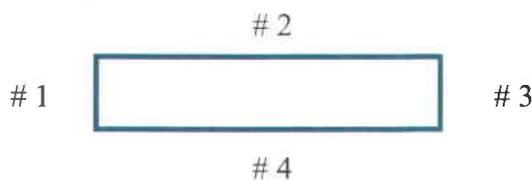
Pour l'aquifère D (Bangladesh), compte tenu des dimensions qui sont importantes (1 km par 500 km), la discrétisation est différente. La grille est composée de mailles rectangulaires de 10 m de hauteur sur 500 m de longueur. La discrétisation pour Δx

respecte les critères du nombre de Péclet et pour Δt celui du nombre de Courant (Anderson and Woesner, 1992).

2.4.3 Conditions aux limites

Les conditions aux limites pour le modèle d'écoulement FLONET et pour le modèle TR2 sont identiques (voir section 2.4.4). Pour la simulation d'âge advectif-disersif avec TR2, il faut préciser d'autres conditions (voir 2.4.5).

2.4.4 Modèle d'écoulement (FLONET/TR2)



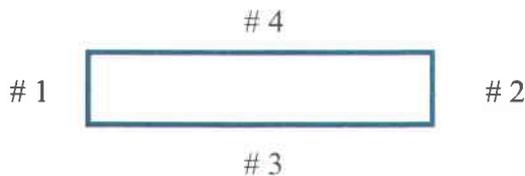
Aquifères A, B et C

- # 1 Type 2 : flux nul.
- # 2 Type 2 : flux entrant $q = 100$ mm/an (recharge homogène).
- # 3 Type 1 : charge fixée $h=50$ m.
- # 4 Type 2 : flux nul, base imperméable.

Aquifère D

- # 1 Type 2 : flux nul.
- # 2 Type 1 : la nappe suit une forme sinusoïdale fixée.
- # 3 Type 2 : flux nul.
- # 4 Type 2 : flux nul, base imperméable.

2.4.5 Modèle de transport (TR2)



- # 1 Type 2 : flux de masse d'âge est nul car $q=0$ sur cette limite.
- # 2 Type 2 : flux de masse d'âge est nul car $A=0$ sur cette limite.
- # 3 Type 2 : flux de masse d'âge est nul car $q=0$ sur cette limite.
- # 4 Type 1 : flux de masse d'âge est nul car $A=0$ sur cette limite.

- # 3 Type 2 : flux de masse d'âge est nul car $q=0$ sur cette limite.
- # 4 Type 1 : flux de masse d'âge est nul car $A=0$ sur cette limite
- # 2 Type 1 : flux de masse d'âge est nul car $A=0$ sur cette limite.
- # 4 Type 2 : flux de masse d'âge est nul car $\nabla A=0$ sur cette limite.

2.5 Résultats et analyse

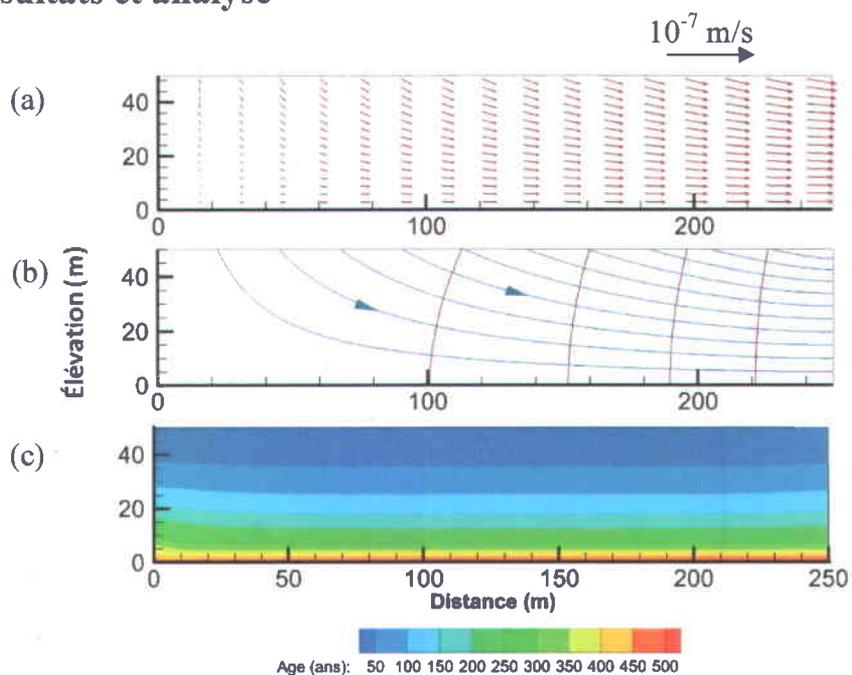


Figure 2.4 Résultats de simulation pour l'aquifère A. (a) Vecteurs vitesses. (b) Lignes d'écoulement de la zone de recharge vers la zone d'émergence et équipotentielles en rouge. (c) Contours des âges advectifs-dispersifs simulés, $A_{\max}=508$ ans, $\alpha_L = 5$ m, $\alpha_T = 0.05$ m, $D_m = 8,64 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, $K_x=K_y=10^{-5} \text{ m/s}$.

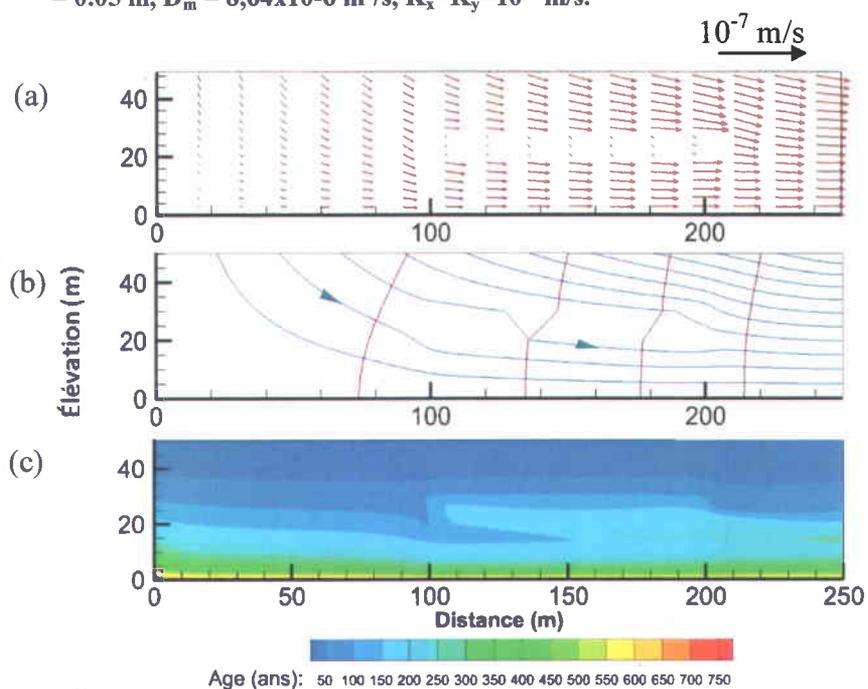


Figure 2.5 Résultats de simulation pour l'aquifère C. (a) Vecteurs vitesses. (b) Lignes d'écoulement de la zone de recharge vers la zone d'émergence et équipotentielles en rouge. (c) Contours des âges advectifs-dispersifs simulés, $A_{\max}=808$ ans, $\alpha_L = 5$ m, $\alpha_T = 0.05$ m, $D_m = 8,64 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, $K_x=K_y=10^{-5} \text{ m/s}$ pour les sables, $K_x=K_y=10^{-6} \text{ m/s}$ pour les silts.

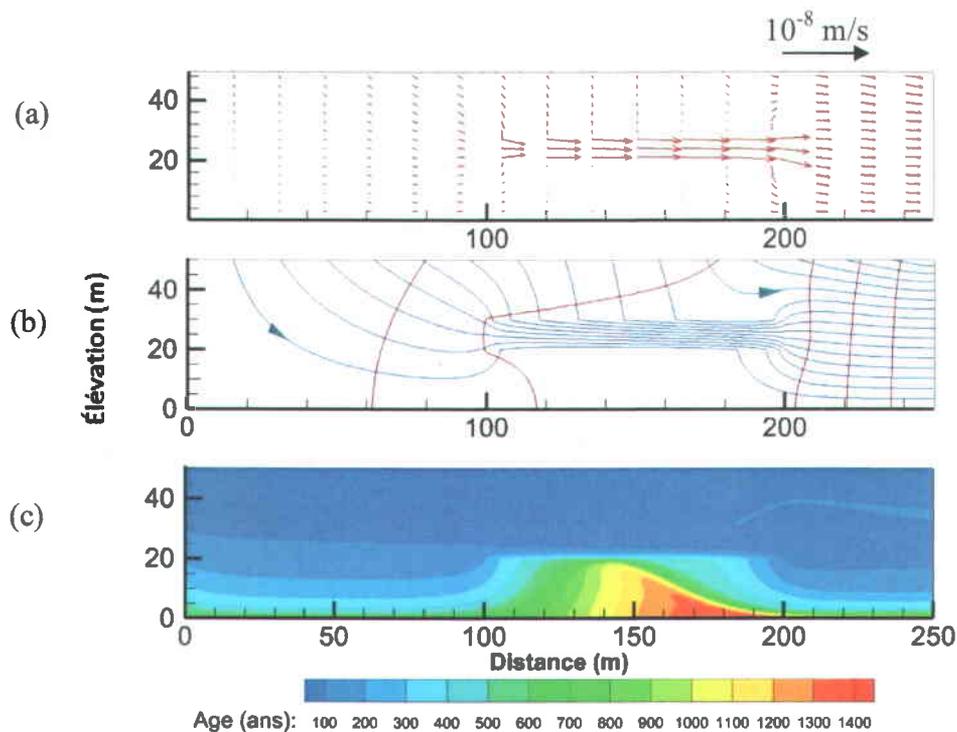


Figure 2.6 Résultats de simulation d'âge pour l'aquifère B. (a) Vecteurs vitesses. (b) Lignes d'écoulement de la zone de recharge vers la zone d'émergence et équipotentielle en rouge. (c) Contours des âges advectifs-dispersifs simulés, $A_{max}=1405$ ans, $\alpha_L=5$ m, $\alpha_T=0.05$ m, $D_m=8,64 \times 10^{-6}$ m²/s, $K_x=K_y=10^{-5}$ m/s pour les sables, $K_x=K_y=10^{-3}$ m/s pour les graviers.

2.5.1 Modèles advectif-dispersif

La Figure 2.4a représente la distribution des vecteurs de vitesse et la Figure 2.4b, les lignes de courant associées à la modélisation de l'aquifère homogène A. Les écoulements sortent perpendiculairement à la limite droite qui est une charge fixée. Les âges, simulés grâce à l'équation d'advection-dispersion (2.4c), augmentent régulièrement avec la profondeur avec A_{max} supérieur à 500 ans à la base de l'aquifère.

Les Figures 2.5 et 2.6 représentent le même type de simulation mais avec des aquifères ayant respectivement une hétérogénéité constituée d'une lentille de silt ou de gravier. On remarque une diminution des vitesses d'écoulement dans les silts (2.5a) et une accélération dans la lentille de gravier (2.6a). Les écoulements sont également perturbés comme le montrent les Figures 2.5b et 2.6b. La distribution des âges, dans les aquifères B

et C, est de fait plus hétérogène (2.5b) et (2.5c) que dans l'aquifère homogène A, même s'il y a toujours une tendance à l'augmentation des âges avec la profondeur.

On retrouve des âges plus élevés dans la lentille de silt du fait des vitesses d'écoulement plus lentes. Sous la lentille de silt, on observe une désorganisation de la gradation de l'âge, avec des eaux plus jeunes sous des eaux plus âgées. Une autre conséquence de la présence d'une couche de perméabilité plus faible est le « panache » d'eau vieille qui s'échappe des silts.

Au contraire, la forte perméabilité des graviers canalise les écoulements (2.6b) du fait de vitesses plus rapides que dans les sables (2.6a). Cela entraîne également une remontée des lignes de courant profondes vers la lentille (2.6b). En conséquence, les vitesses d'écoulement sont très faibles sous la lentille de gravier ce qui provoque la présence d'une zone d'âge élevée, avec un maximum supérieur à 1400 ans.

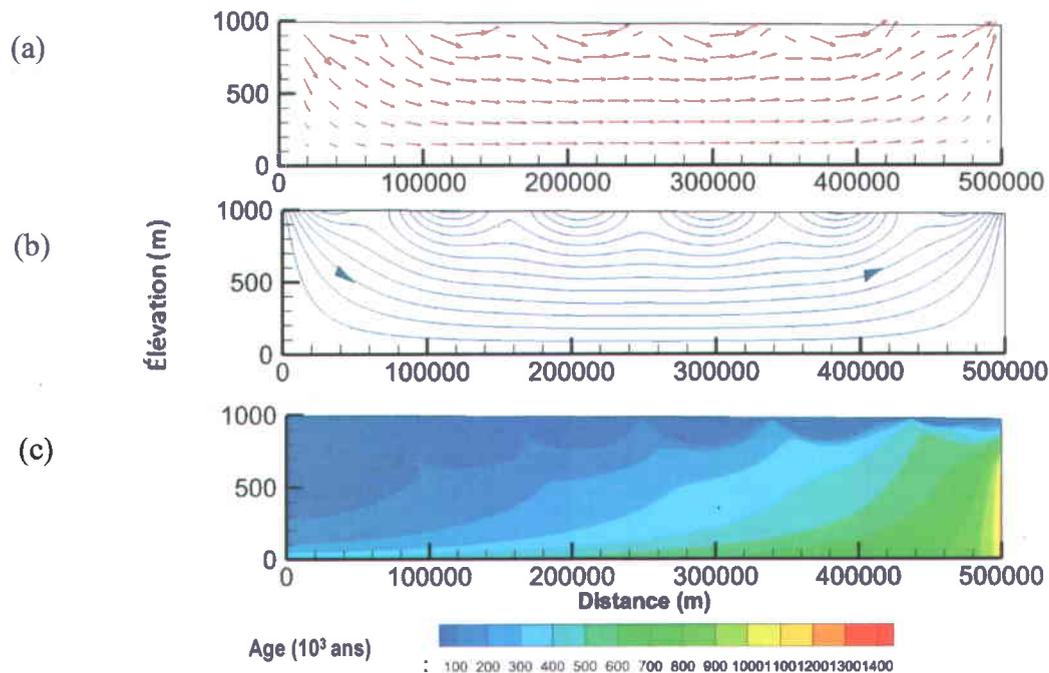


Figure 2.7 Résultats de simulation d'âge pour l'aquifère D. (a) Vecteurs vitesses. (b) Lignes d'écoulements de la zone de recharge vers la zone d'émergence. (c) Contours des âges advectifs-dispersifs simulés, $A_{max}=1440$ ans, $\alpha_L = 5\text{m}$, $\alpha_T = 0.05$ m, $D_m = 8,64 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, $K_x=10^{-4}$ m/s, $K_y=10^{-8}$ m/s.

Pour l'aquifère D, la Figure 2.7a montre des vitesses d'écoulement globalement très faibles, de l'ordre de 10^{-9} m/s. Les vitesses d'écoulement sont, de façon générale, plus rapides au niveau des zones d'émergence locales. Au niveau des écoulements, on note une composante régionale profonde (au-delà de 500 m) avec une circulation horizontale (2.7b) qui remonte vers une zone d'émergence dans le coin supérieur droit de l'aquifère.

La première observation concernant la simulation des âges (2.7c) est son hétérogénéité. Régionalement, on observe que l'âge augmente de la zone de recharge vers la zone d'émergence à droite. Le même phénomène se produit dans les zones locales en surface, mais la gamme de couleur choisie ne permet pas de représenter des variations d'âges inférieures à 100×10^3 (100 000) ans.

Dans la partie droite de l'aquifère, on observe des saillies d'eaux plus vieilles dues à la remontée d'écoulements plus profonds. Étonnamment, on remarque des pics similaires en profondeur. Cependant, cela ne peut pas s'expliquer par une remontée des écoulements, mais peut-être par une légère diminution des vitesses d'écoulement.

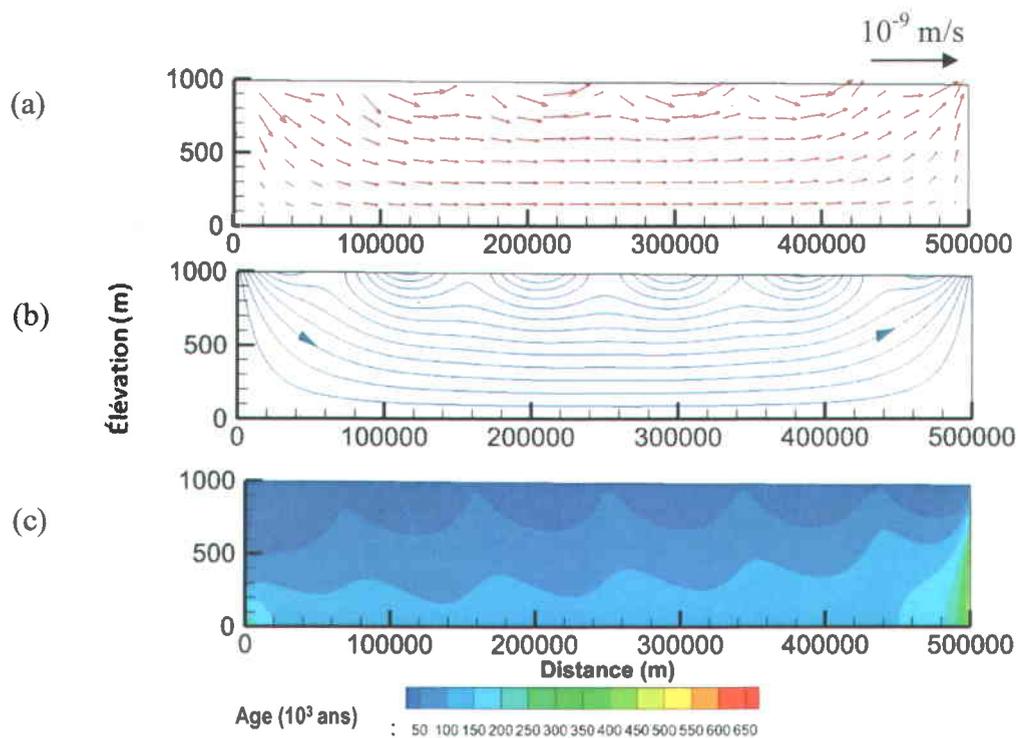


Figure 2.8 Résultats de simulation d'âge pour l'aquifère D. (a) Vecteurs vitesses. (b) Lignes d'écoulements de la zone de recharge vers la zone d'émergence. (c) Contours des âges advectifs-dispersifs simulés, $A_{max}=706$ ans, $\alpha_L=500$ m, $\alpha_T=5$ m, $D_m = 8,64 \times 10^{-6}$ m²/s, $K_x=10^{-4}$ m/s, $K_y=10^{-8}$ m/s.

L'augmentation de la dispersivité ($\alpha_L=500$ m et $\alpha_T=5$ m) induit une différence importante dans la distribution des âges. En effet, la gamme d'âge obtenue (2.8c) est inférieure à la simulation précédente (2.7c). On retrouve un effet d'ondulation marqué, en surface, dû à des remontés d'eaux plus vieilles. Visuellement, des ondulations similaires sont observables en profondeur, mais elles ne sont pas liées à des perturbations dans les écoulements mais potentiellement à des erreurs numériques inhérentes à l'exagération verticale.

2.5.2 Comparaison des modèles

Pour la suite de l'étude, les âges advectifs ont été calculés pour les aquifères A, B et C, à partir du modèle TRAVEL, sur une centaine de points (*travel.dat* : $ds=100$) entre deux *streamfunctions* extrêmes ($s_1=0$ et $s_2=-7,9.10^{-07}$). Le modèle calcule une distribution des âges au niveau de la limite de sortie (limite droite de l'aquifère) selon la méthode présentée précédemment. On note que l'âge advectif n'est pas calculé dans les cinq premiers mètres de profondeur, en raison du choix de s_2 .

Une extraction des âges advectifs-dispersifs des modèles précédents (2.4c, 2.5c et 2.6c) a également été réalisée au niveau de la limite de sortie des écoulements. Cette extraction a été opérée sur deux cents points, soit un âge tous les 25 cm afin d'obtenir plus de précision dans le tracé de la courbe. Les résultats sont fournis par la Figure 2.8.

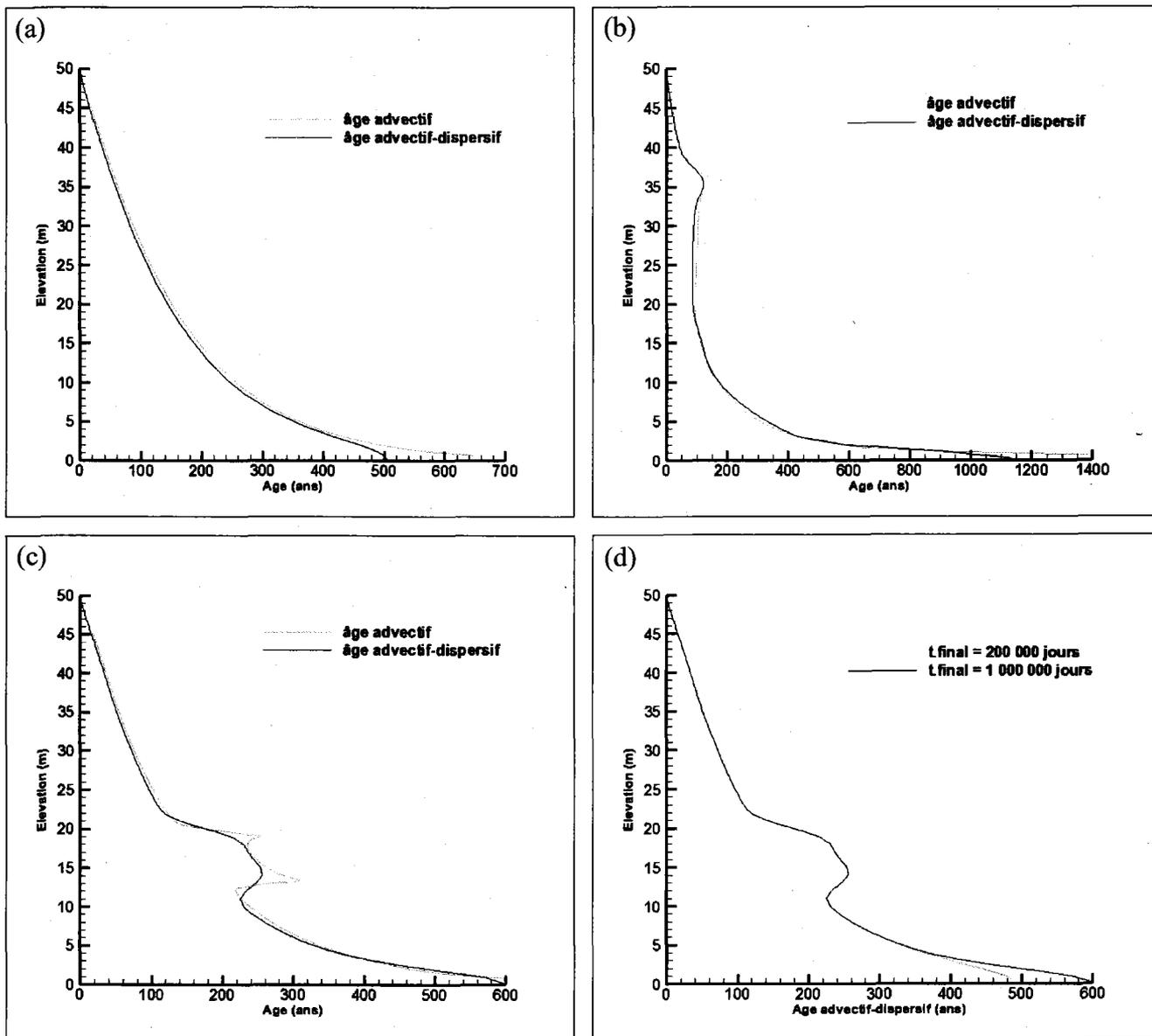


Figure 2.9 (a), (b) et (c) Comparaison de la distribution des âges advectifs et advectifs-dispersifs en fonction de la profondeur à la limite droite respectivement pour les aquifères A (sable), B (sable-gravier) et C (sable-silt). (d) Comparaison des âges advectifs-dispersifs de l'aquifère C, à la limite droite, et à deux temps différents.

Pour l'aquifère sableux homogène A (2.8a), on observe une augmentation régulière des âges avec la profondeur pour les deux modèles. On note que les âges advectifs sont légèrement au-

dessus des âges obtenus via le modèle d'advection-dispersion (la courbe rose est au-dessus de la courbe noire). Cette observation est encore plus significative dans le fond de l'aquifère avec une différence entre les deux modèles de plus de 150 ans. Une première conclusion, identique à celle de Goode (1996), est que la dispersion tend à limiter les âges maximum.

Pour les aquifères sableux ayant des hétérogénéités de gravier ou de silts, malgré une tendance globale à l'accroissement des âges avec la profondeur, on remarque des augmentations brusques à 35m (2.8b) et entre 10 et 20 m environ pour la Figure 2.8c.

La présence de la lentille de gravier, où les vitesses d'écoulement sont plus rapides, provoque un « rajeunissement » des âges, au même niveau, à la limite de sortie. Cette hétérogénéité génère également un effet antagoniste, en créant un pic d'âge élevé à 35 m, lié à la remontée des lignes d'écoulement. Les âges élevés au fond de l'aquifère sont dus aux faibles vitesses sous la lentille de gravier dont l'effet se répercute à la limite. Au niveau du pic et dans le fond de l'aquifère, les âges advectifs sont plus élevés : ceci conforte la conclusion précédente sur la dispersion.

Une analyse presque identique peut être faite pour l'aquifère C. Ici, la présence de la lentille de silt, augmente cette fois les âges à la limite. On retrouve ici l'effet des aquitards qui agissent comme des « diffuseurs » d'eaux vieilles dans les aquifères (Bethke et Johnson, 2002).

Pour les aquifères hétérogènes, on note qu'en certains endroits les âges advectifs sont inférieurs aux âges advectifs-dispersifs. Cela peut peut-être s'expliquer par un effet du nombre de *streamfunctions* choisi pour les calculs ou alors du nombre de points insuffisants pour l'intégration de l'âge advectif-dispersif. Toutefois, cela pourrait aussi être attribuable à l'effet de la dispersion qui adoucirait le profil des courbes en atténuant les forts gradients.

La Figure 2.8d, qui n'est pas en lien direct avec les autres Figures, illustre simplement l'effet de l'obtention du régime permanent pour l'aquifère C. On constate que, d'un point de vue de l'âge advectif-dispersif, la partie supérieure de l'aquifère atteint le régime permanent bien avant les quelques derniers mètres plus en profondeur.

2.6 Conclusion

Ce chapitre a permis de comparer deux méthodes de simulation d'âge (par advection et par advection-dispersion) pour différents modèles d'aquifères 2D, homogène ou hétérogènes.

Les âges obtenus, le long de la limite de sortie des écoulements, ont mis en évidence des différences marquées entre les deux méthodes, principalement au niveau des valeurs maximales, mais également, de façon moins marquée, sur tout le long du profil : les âges advectifs étant supérieurs. Deux conclusions s'imposent suite à cette observation :

- le modèle advectif surestime les âges à la limite, et
- la dispersion lisse les âges obtenus en réduisant les maximums.

La modélisation d'âges advectifs-dispersifs, sur plusieurs aquifères, a également permis de simuler l'effet de la structure de l'aquifère sur les âges.

Les âges maximums ne sont pas obtenus dans le système homogène ni dans celui présentant la lentille de silt, mais bien dans celui avec l'hétérogénéité de gravier. Ceci conforte le fait que l'obtention « d'âges maximum est hautement dépendant de la structure de l'aquifère et de la configuration des conditions aux frontières » (Goode, 1996).

La nappe fixée selon une fonction sinusoïdale influence de façon marquée les âges advectifs-dispersifs, en créant des « ondulations » qui semblent se répercuter en profondeur, sans perturbation apparente du système d'écoulement. Ces ondulations sont amplifiées par l'augmentation de la dispersivité qui tend également à réduire les âges.

3 MODELING AQUIFER HETEROGENEITY AND ITS IMPACT ON DISPERSIVITY AND GROUNDWATER AGE IN A DELTAIC SAND AQUIFER

by Emmanuelle Millet¹, René Lefebvre¹, Erwan Gloaguen¹, Thomas Ouellon², Martin Blouin¹, John W. Molson³

1: Institut national de la recherche scientifique (INRS), Centre Eau Terre Environnement, Québec, Québec, Canada; 2: Golder Associates, Québec, Québec, Canada; 3: Laval University, Geology and Geological Engineering Department, Québec, Québec, Canada.

3.1 Abstract

It is accepted that the spatial heterogeneity of hydraulic conductivity (K) plays a major role in groundwater flow and mass transport. In this study we propose to quantify these effects at the scale of a 15 km² study area within the unconfined Valcartier deltaic sand aquifer. Due to the presence of dissolved trichloroethene (TCE) plume, the site has been extensively characterized, including hydrostratigraphy information from borehole logs (7000 m logged from 430 locations). The characterization also involved groundwater dating using the tritium-helium method. Observed and simulated groundwater age and the extent of the TCE plume were used as indicators of the dispersive effect of different levels of heterogeneity in a numerical groundwater flow model. The first part of the study involved the definition of K fields with three different levels of heterogeneity. A homogeneous K field used the horizontal (K_h) and vertical (K_v) values of K that provided the best calibration of the numerical model to hydraulic heads. The second level of heterogeneity was taken from a previous study where the authors kriged the proportions of four hydrofacies (HF) based on borehole log descriptions and derived K_h and K_v values using generalized means for layered media. The third level of K heterogeneity was obtained from a two-step nested stochastic modeling process. First, HF distributions were simulated using a multiple point algorithm based on the HF units identified from borehole logs and a training image providing structural information on the spatial HF distribution. The second step involved

the simulation of the K heterogeneity within each HF using sequential Gaussian simulations for each HF simulation obtained in the first step. This procedure leads to 60 K models reproducing the two levels of spatial heterogeneity. In the second part of the study, advective groundwater ages obtained from particle tracking were compared for the models with the three levels of heterogeneity. Mass (TCE) and age transport were also compared for the two deterministic K models. Results show that heterogeneous K models have dispersive effects, even on particle tracking that matches measured groundwater ages. Still, quite small dispersivity values had to be used in mass transport of TCE and age to match observations and particle tracking results. Heterogeneous models were thus shown to embed dispersive effect related to their heterogeneous K fields, which may limit dispersivity scale effects plaguing homogeneous numerical models. Groundwater age was also shown to have the potential to be used as a transverse vertical dispersivity indicator, but it did not provide constraints on longitudinal dispersivity. Overall, the kriged K model reproduced observed age data and the shape of the plume more accurately, showing that stochastic simulations in the way they were used may exaggerate the level of HF and K heterogeneity. This work provides insights into how different representations of aquifer heterogeneity can affect dispersion and mass transport (as represented by age and TCE), and it illustrates the potential use of groundwater age as an indicator of dispersion.

3.2 Résumé

Il est reconnu que l'hétérogénéité spatiale de la conductivité hydraulique (K) joue un rôle majeur sur les écoulements et le transport de masse. Cette étude propose de quantifier ces effets sur l'aquifère deltaïque de Valcartier qui s'étend sur 15 km². En raison d'une contamination dissoute de trichloroéthène (TCE), le site a été largement caractérisé et inclus de l'information hydrostratigraphique issus de descriptions de forage (7000 m à 430 localisations). Cette caractérisation inclus également des mesures d'âges isotopiques obtenues avec la méthode tritium-hélium. Les âges observés et simulés ainsi que l'étendu du panache de TCE ont été utilisés, au sein d'un modèle numérique d'écoulement, comme indicateurs des effets dispersifs

de différents niveaux d'hétérogénéité. La première partie de cette étude présente la définition des champs de K avec trois niveaux d'hétérogénéité. Un champ de K homogène utilise les valeurs horizontale (K_h) et verticale (K_v) de K qui fournissent le meilleur calage des charges avec le modèle numérique. Le deuxième niveau d'hétérogénéité est issu des travaux de Ouillon et al. (2008) qui ont krigé les proportions de quatre hydrofaciès (HF) en se basant sur les descriptions de forage et en dérivant les valeurs de K_h et K_v de formules de moyenne généralisée dans un milieu stratifié. Le troisième niveau d'hétérogénéité de K a été obtenu grâce à l'utilisation conjointe de deux méthodes stochastiques. Premièrement, l'utilisation des géostatistiques multipoints a permis de définir la distribution spatiale des HFs en se basant sur l'identification des HFs sur les descriptions de forage ; et en se basant également sur l'utilisation d'une image d'apprentissage, permettant d'intégrer une information structurelle à la distribution des HFs. Deuxièmement, par le biais des simulations séquentielles Gaussiennes, la distribution de l'hétérogénéité de K s'est faite au sein de chaque HF pour chaque réalisation d'HF. Cette méthodologie a abouti à la création de 60 réalisations de K reproduisant ainsi deux niveaux d'hétérogénéité. Dans la seconde partie de cette étude, l'âge advectif obtenu par traçage de particule a été comparé pour les trois niveaux d'hétérogénéité. Le transport de masse (TCE) et d'âge a également été comparé pour les deux modèles déterministes. Les résultats ont montré que les modèles hétérogènes possédaient des effets dispersifs, même avec un traçage de particule contrôlé par l'advection, induisant une bonne correspondance avec les âges mesurés. De faibles valeurs de dispersivité ont toutefois dû être utilisées pour le transport de masse de TCE et d'âge pour égaler les mesures et les résultats du traçage de particule. Les modèles hétérogènes ont donc montré une intégration des effets dispersifs causés par l'hétérogénéité du champ de K , permettant ainsi de limiter les effets d'échelle de dispersivité dont souffrent les modèles numériques homogènes. Le potentiel de l'âge a également été montré en tant qu'indicateur de la dispersivité transversale, mais ne fournit pas de contrainte sur la dispersivité longitudinale. Globalement, le modèle de K krigé restitue de manière plus adéquate les âges mesurés ainsi que la forme du panache, montrant que les modèles stochastiques tels qu'ils ont été produits pourraient exagérer le niveau d'hétérogénéité des HF, et donc de K . Cette étude fournit un aperçu sur l'impact que peuvent avoir différentes représentations de l'hétérogénéité d'un aquifère sur la

dispersion et le transport de masse (représenté par l'âge et le TCE), et illustre l'utilisation potentielle de l'âge comme indicateur de la dispersion.

3.3 Introduction

In order to adequately understand groundwater flow and mass transport within an aquifer, there is a need to adequately model the spatial heterogeneity of its hydrofacies (HF) and hydraulic conductivity (K) (de Marsily et al., 2005). It is indeed a major concern for the characterization of water resources as well as for the study of dissolved contaminants (Barry, 1993). In the last few years, inspired by petroleum reservoir modeling algorithms (Chambers et al., 2000), the conventional deterministic approach to define HF or K fields in aquifers has been improved by the use of stochastic simulations that generate a set of equiprobable models with regards to the data representative of the spatial variability of HF and K (Sudicky 1986, Graham 1991, Kabala 1991, Renard 2007). There are many algorithms to simulate both HF and K heterogeneity. These methods enable time efficient construction of multiple statistically equivalent high-resolution hydrogeological facies models and K distributions. Goovaerts (1997) presents a review of the different approaches and algorithms used for such purposes in environmental studies. Applications of geostatistical simulations to hydrogeological modeling using truncated plurigaussian simulations can be found in Mariethoz et al. (2009) and for a 2D domain in Frei et al. (2009). To model complex geological structures such as paleo-deltaic systems, statistics using two-point correlation such as indicator or Gaussian truncated simulation techniques poorly reproduced specific geometries (Strebelle 2002). To reproduce of these types of systems, multiple-point geostatistics (MPG) (Hu and Chugunova 2008; Guardiano and Srivastava 1993) infer simulated values reproducing patterns from training images (Caers 2002). In the present paper, we follow the workflow developed by Blouin et al. (2012), involving, first, the use of MPG to define HF distribution heterogeneity, followed by a step assigning K values to HFs based on the K distributions by HF using a standard Sequential Gaussian algorithm (Journel and Huijbregts 1978). This approach allows modeling the uncertainty associated with spatial

distributions of the aquifer properties, while accounting for data scarcity (Doyen 2007). However, since this approach leads to several equiprobable representations of the heterogeneity, working with stochastic modeling requires, at some point, discrimination between models (Fetter 1999; p.86). Such discrimination often involves the comparison of model-predicted results with results of a tracer field test (Sposito and Barry 1987; Barry, Coves and Sposito 1988).

One difficulty in assessing models of HF or K heterogeneity, is finding data sets that permit the assessment of K heterogeneity at different scales. Indeed, large-scale variations of K have a major impact on flow (with visible effects on hydraulic heads and their spatial distribution), whereas small scale K variations influence mass transport, as it impacts the dispersion. Studying numerical and intrinsic dispersion is particularly important with regards to contamination issues because the dispersion spreads the plume by decreasing strong concentration gradients (Adams and Gelhar 1992). Inferring the numerical dispersion parameters is still a challenge: values of longitudinal and transverse dispersivity used in numerical models depend on model dimensions, i.e. the observation scale (Fried 1975, Barry 1993, Gelhar 1986, Schulze-Makuch 2005). As a consequence, in complex cases, the adjustment of dispersion parameters can be difficult (Schulze-Makuch 2005). We hypothesize, as did Ouellon et al. (2008), that if the spatial distribution of K could be defined with a high degree of detail, the resulting heterogeneous numerical models would be intrinsically dispersive (with limited numerical dispersion), which may at least partly release such numerical models from dispersivity scale effects.

In the Valcartier study site, thanks to a large amount of data, there is an opportunity to use geostatistical tools as it provided increased confidence in the spatial structure analysis both in the case of high and two-point statistics (Kolterman and Gorelick 1996). In addition, the wide variety of data available for this site provides a means to constrain or verify if models using different levels of K heterogeneity would provide more representative responses from a numerical simulator (Ouellon et al. 2012).

In this study, numerical models are tested against available data and compared with three levels of heterogeneity: 1) a homogeneous model of K , 2) a kriged model of K from Ouellon et al. (2008) and 3) stochastic models of K based on the methodology presented by Blouin et al.

(2012). The homogeneous K model is representative of the two major hydrostratigraphic units (deltaic and pro-deltaic) in the aquifer and has sharp stratigraphic contacts. The kriged K model shows a fairer reproduction of heterogeneity but no particular spatial structure. The latter two models use a nested approach to reconstitute both the spatial structure, using Multiple Point Simulations (MPS) (Guardiano and Strivastava 1993, Strebelle and Journel 2000, Caers, 2002), and a smaller scale K heterogeneity of HFs using Sequential Gaussian Simulations (SGS) (Deutsch and Journel 1992, Koltermann and Gorelick 1996, Goovaerts 1997). This method allows the reproduction of two scales of heterogeneity involving macro and microdispersion.

Secondly, following a well-known hydrogeological simulation process, these heterogeneity models are integrated within a numerical simulator of flow and dissolved mass transport, FEFLOW (WASY 2005). Impacts of different 3D K models on hydraulic head, flow patterns and particule tracking are then simulated. Two kinds of data are also used: classic data linked to a TCE contamination plume; and non-conventional data involving measured tritium/helium ratios known to be a proxy of groundwater ages (Poreda et al. 1988, Schlosser et al. 1988, Ekwurzel et al. 1994, Szabo et al. 1996, Plummer et al. 1998b, Murphy et al., 2011). Indeed, as pointed out by Cornaton (2004), age is a property that is transported in groundwater by advection, but also by dispersion. Using the approach developed by Goode (1996) and implemented in FEFLOW, age modeling is thus used to assess the dispersive impact of K fields having different levels of heterogeneity.

This study intends to make an original contribution to the application of groundwater age in a context for which its potential is starting to be investigated. Engdahl et al. (2013) have recently suggested to study the impact of different heterogeneous K fields on groundwater age transport with the aim of using age as an indicator of dispersion. By varying dispersivity parameters α_L and α_T , the calibration of simulated age with observed ages allow the estimation of the intrinsic dispersive effect of the K field. The use of groundwater age also allows, contrary to environmental tracers, the comparison of two simulation methods, with (advective-dispersive ages) or without dispersion (particle tracking advective ages), thus providing an indication of the hydrodynamic dispersion related to heterogeneous K fields.

Hydrogeological and hydrogeophysical characterizations of aquifer heterogeneity have generally been restricted to small sites (Sudicky 1986, Rubin and Hubbard 2005), and the impact of heterogeneity on mass transport has been assessed mostly using “synthetic” aquifers, for lack of sufficiently characterized sites (Carle et al. 2006). Recent efforts have aimed to provide the needed data to characterize the heterogeneity of larger sites (Ruggeri et al. 2013). The present study thus also makes a contribution by providing a rare case study of the application of heterogeneity assessment for an actual aquifer system at the “regional scale” of a contaminated site, i.e. at a scale of a few km² encompassing source zones and receptors. The study site provides relatively favorable conditions to the study of transport processes, especially for groundwater age, as it is devoid of complex mixing and dispersive effects related to the presence of low permeability layers with silt and clay. The burrid valley of the Valcartier deltaic aquifer only has sand facies in the area where the numerical modeling is focused. The aquifer is expected to have good connectivity and the excellent agreement of tritium-helium data with the atmospheric tritium input concentration shows that very limited mixing with “old” or “stagnant” groundwater occurs in this aquifer (Murphy et al. 2011).

3.4 Study Area

The Valcartier sector is located 30 km north-west of downtown Quebec City, Canada. Figure 3.1 shows that the study area is relatively flat and that it is bordered by the Jacques-Cartier River to the west, the Nelson River and Mount Brillant to the east and Mount Rolland-Auger to the south. The flat area extends about 1 km further north than the area shown on the map to another hill. The heterogeneous spatial distribution of hydrofacies and hydraulic conductivity (K) was defined in the 15 km² central part of the study area indicated on Figure 3.1, which also corresponds to the extent of the numerical model used in the present study. The shaded area on the map corresponds to a dissolved TCE plume in a deltaic sand aquifer at a concentration exceeding 5 µg/L, which extends over about 4.5 km. In 1997, TCE was discovered in drinking water of the Valcartier Garrison from wells tapping groundwater from the area. Then, in 2000, TCE was detected in

private wells of the neighboring municipality of Shannon, to the west. Over the following years, detailed characterization programs allowed the understanding of the local groundwater flow system, delineated the extent of the dissolved plume and identified potential source zones (Ouellon et al. 2012).

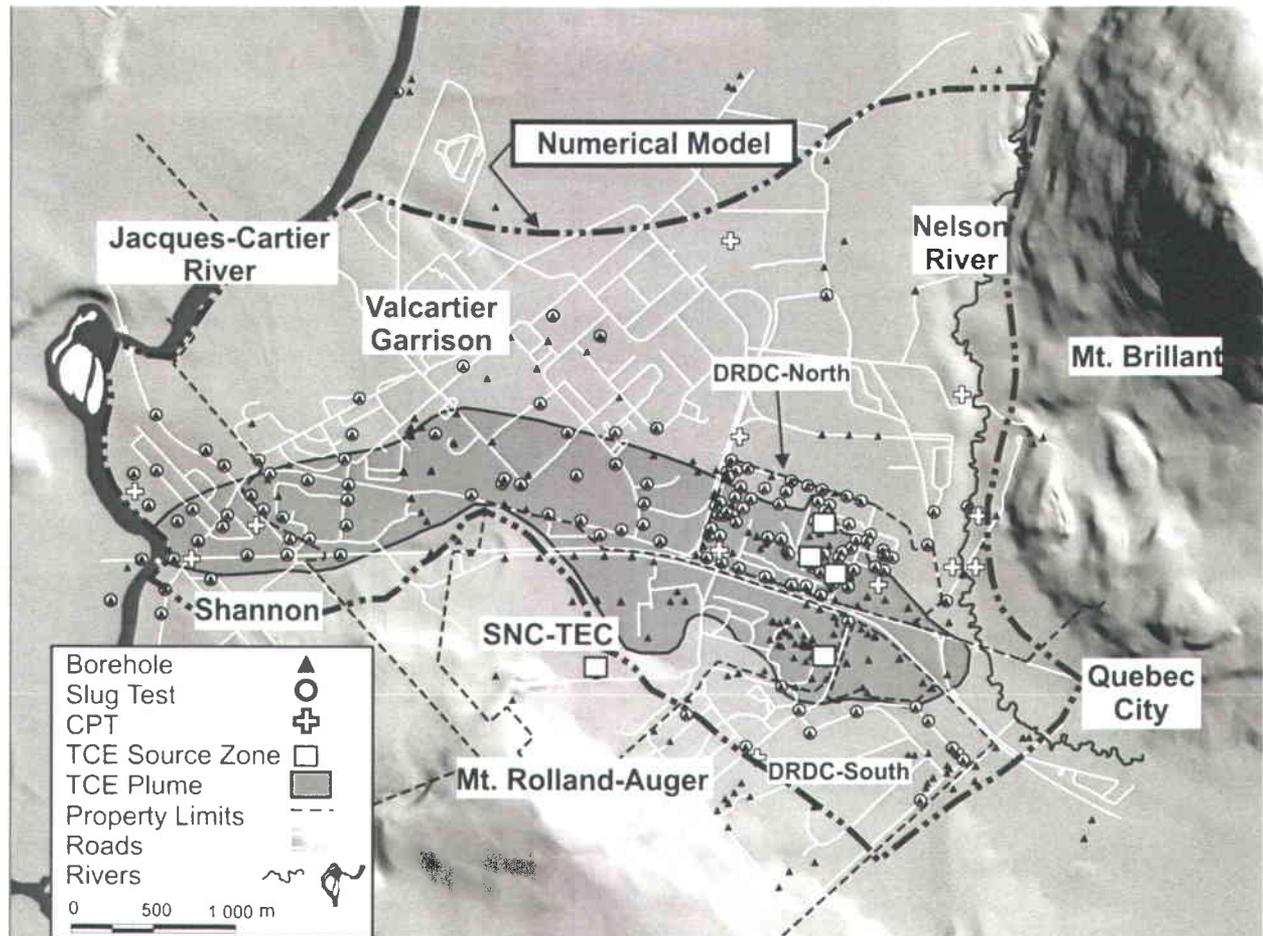


Figure 3.1 Study area and spatial distribution of the main types of available data (Modified after Ouellon et al. 2008)

Figure 3.2 shows the hydrostratigraphic model of the Valcartier aquifer system for an area corresponding to the extent of the numerical model indicated on Figure 3.1. A crescent-shaped buried valley, filled by with up to 50 m of sediments, extends east–west in the study area. The present study focuses on the deltaic aquifer, made up of sand and gravel, and the prodeltaic

aquitard with interlayering of silts, clayey silts and sandy silts. The deltaic aquifer thickness reaches up to 45 m and it is unconfined over most of the study area, except to the east where the prodeltaic aquitard splits the deltaic sands in two parts. There is lateral continuity in the upper and lower deltaic sands with the deltaic sands found to the west where the prodeltaic aquitard is absent. This prodeltaic aquitard has a horseshoe shape and is itself continuous in the east of the study area. The deltaic aquifer is separated from an underlying aquifer made up of diamictons (tills and proglacial sediments) by an aquitard made up of glaciomarine silt.

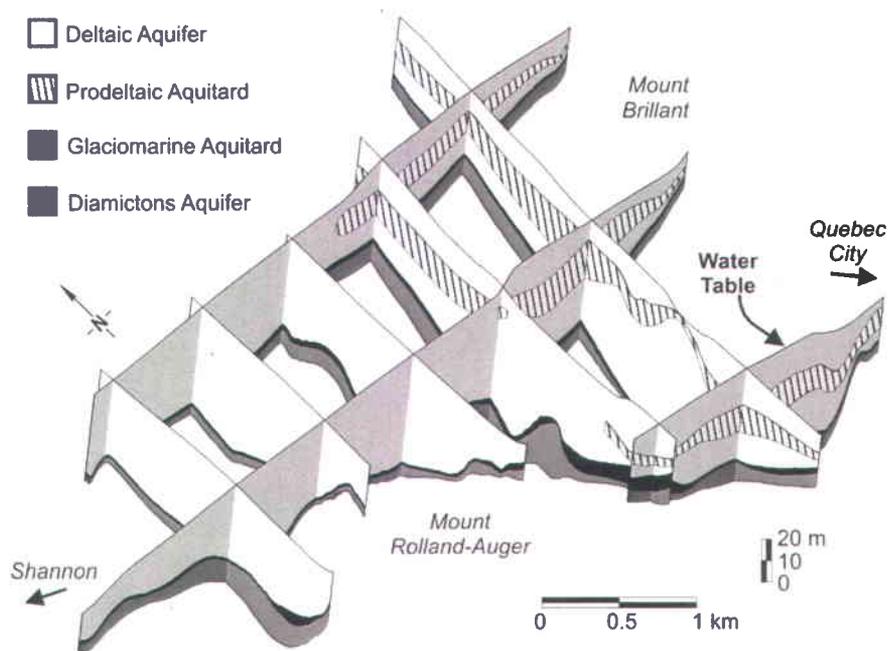


Figure 3.2 Hydrostratigraphic model of the Valcartier aquifer system viewed from the southwest toward the northeast (Modified after Ouellon et al. 2008). The model shows hydrogeological units above bedrock over the numerical model area shown on Fig. 2.1. The upper limit is the water table. Locations (in *italic*) of features shown in Fig. 3.1 are indicated. This study considers the deltaic aquifer and prodeltaic aquitard.

Due to the important characterization efforts dedicated to the understanding and management of the TCE contamination (Ouellon et al. 2010), the hydrofacies (HF) and hydraulic conductivity (K) heterogeneity model construction presented in the next section is based on the use of

numerous and varied data. The map of Figure 3.1 shows the spatial distribution of the main types of data available in the Valcartier sector. Data are available at a higher density within the TCE plume, but are also available throughout the area within which the hydrogeological numerical model was developed, which is also where the spatial distribution of hydrofacies and K was defined. The model of K heterogeneity only covers the deltaic sediments (deltaic aquifer and prodeltaic aquitard). Sediments underlying the deltaic aquifer are still included in the numerical hydrogeological model, but due to limited data their properties are represented as homogeneous and constant for all models.

There are also more data in the deltaic aquifer because this is where most of the dissolved TCE is located. Available data that can be used to constrain the HF and K fields include about 300 slug tests, 7000 m of borehole logs from 430 locations, 137 grain size analyses and 275 m of Cone Penetration Tests (CPT) allowing the identification of Valcartier HF (Ouillon et al. 2008). Available data that can constrain numerical model results include hydraulic heads (about 550 measurements), flow patterns as indicated by geochemical tracers, the extent of the TCE plume, and tritium-helium groundwater ages (Ouillon et al. 2008, Murphy et al. 2011, details in Ouillon et al. 2010). Also available was an independent estimate of groundwater recharge based on well hydrographs from an analog adjacent area (Lefebvre et al. 2011).

3.5 Methods

3.5.1 Definition and properties of hydrofacies

The present study uses the same methodology as Ouillon et al. (2008) to classify hydrofacies at the Valcartier aquifer. Here, we define hydrofacies as geological materials with distinct statistical distributions of hydraulic properties (Frei et al. 2009, Fleckenstein et al. 2006). In the case of the Valcartier aquifer system, hydrofacies were clustered by regroupings of borehole log descriptions, validated by 1) the ranges of hydraulic conductivity obtained from slug tests for the hydrofacies, 2) the ranges of grain sizes of the hydrofacies, and 3) the mechanical properties of

the hydrofacies measured by cone penetration tests (CPT). One hydrofacies corresponds to diamictons and is not discussed in this paper as there were not enough data to define the spatial distribution of K in the diamicton aquifer. Table 2.1 summarizes the properties of the deltaic hydrofacies, HF1 to HF4 corresponding to increasingly coarser and more permeable materials. HF1 represents the material found in the prodeltaic aquitard and is mainly found in the eastern part of the study area (Figure 3.2). Figure 3.3 shows the distribution of slug test values assigned to deltaic hydrofacies. Even if the HF have distinct distributions, some overlap is observed between K distributions, especially for HF2 and HF3. There is also a more extensive spread of $\log K_h$ for HF3 and HF4 than for HF1 and HF2. The values shown in Figure 3.3 do not actually correspond to K values of “pure” hydrofacies, as slug test values were assigned to hydrofacies based on the mean “score” of borehole log description over the screen interval. Slug test values are thus a mix of hydrofacies and do not correspond to true hydrofacies properties (Ouillon et al. 2008). Table 2.1 shows the final K_h and K_v values of hydrofacies that were derived by Ouillon et al. (2008) by matching the estimates of K_h and K_v obtained from generalized means for layered media using the kriged proportions of hydrofacies compared to the reference provided by the interpolated K_h values from slug tests (Ouillon et al. 2008).

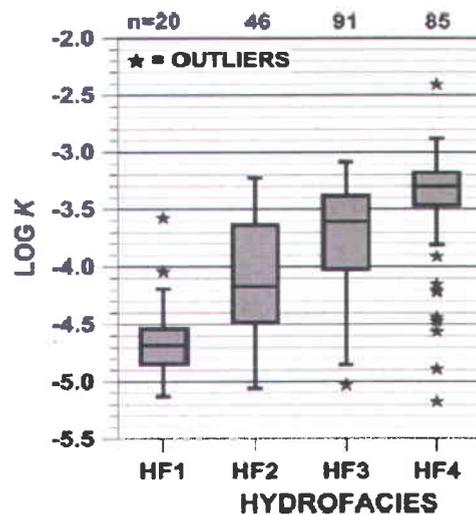


Figure 3.3 Boxplots of the distribution of K measurements from slug tests assigned to deltaic hydrofacies (after Ouillon et al. 2008). The base, center line and top of the box correspond, respectively, to the 25th percentile, the median and 75th percentile, whereas stars identify outliers. The number of data points (n) is indicated on top of the graph.

Table 3.1 Summary of deltaic hydrofacies properties

Hydrofacies	Materials	Median d_{10} (mm)	Slug test* $\log K_h$ (m/s)	Final** $\log K_h$ (m/s)	Final** $\log K_v$ (m/s)
HF1	Clay, silts and sandy silts	0.0015	-4.7	-6.0	-9.0
HF2	Silty sands	0.055	-4.2	-5.0	-7.0
HF3	Fine to medium sands	0.15	-3.6	-4.0	-5.0
HF4	Medium to coarse sands, gravelly sands	0.29	-3.3	-2.9	-2.9

*: slug test values were assigned to hydrofacies (Figure 3.3) based on the mean “score” of borehole log descriptors over the screen interval. Slug test values are thus for a “mixture” of hydrofacies and do not correspond to “pure” hydrofacies properties (Ouellon et al. 2008).

** : final K_h and K_v values of hydrofacies allowed the matching of estimates obtained from generalized means for layered media using the kriged proportions of hydrofacies versus the interpolated K_h values from slug tests (Ouellon et al. 2008).

Using these definitions and hydraulic conductivities of the hydrofacies, the next sections describe how a homogeneous and two heterogeneous models of the spatial distribution of hydrofacies and hydraulic conductivity in the deltaic aquifer were developed to be used as a basis for numerical modeling.

3.5.2 Construction of the homogeneous model

A homogeneous model was built as a “reference case” or “base case” to compare with the two other models. This first K model is representative of the simplified hydrostratigraphy of the deltaic aquifer in which only two homogeneous K units are represented, the sandy aquifer and silty aquitard (Figure 3.2). In this simplified model, the entire aquifer is discretized using one homogeneous layer. The equivalent homogeneous value of $\log K_h$ of -3.6 (2×10^{-4} m/s) was obtained by matching observed heads in the regional deltaic aquifer with the analytical solution

of Chesnaux et al. (2005) for the estimated recharge of 300 mm/y for the aquifer (Ouillon et al. 2010, Lefebvre et al. 2011). Observed heads are projected along an east-west flow path, thus allowing the simplification of the system to one dimension. Since this value of equivalent K_h corresponds to that of HF3 (Table 2.1), the same ratio of K_h/K_v as HF3 (10) was assigned to the sand unit of the homogeneous model, the value of $\log K_v$ used was thus -4.6. For the silty aquitard, the value of $\log K_h$ used was similar to that obtained from slug tests (-4.5, Table 2.1), to account for the interlayering of sandy and silty materials in the aquifer. Since groundwater flow is vertical and downward through the aquitard, the value of K_h for the silty aquitard is not of much significance to the flow simulations. For the vertical hydraulic conductivity, the value of HF1 was assigned to the silty aquitard ($\log K_v = -9$). A verification was made to ensure that the hydraulic conductivity of materials assigned in the homogeneous model allowed matching the observed heads with the numerically simulated heads.

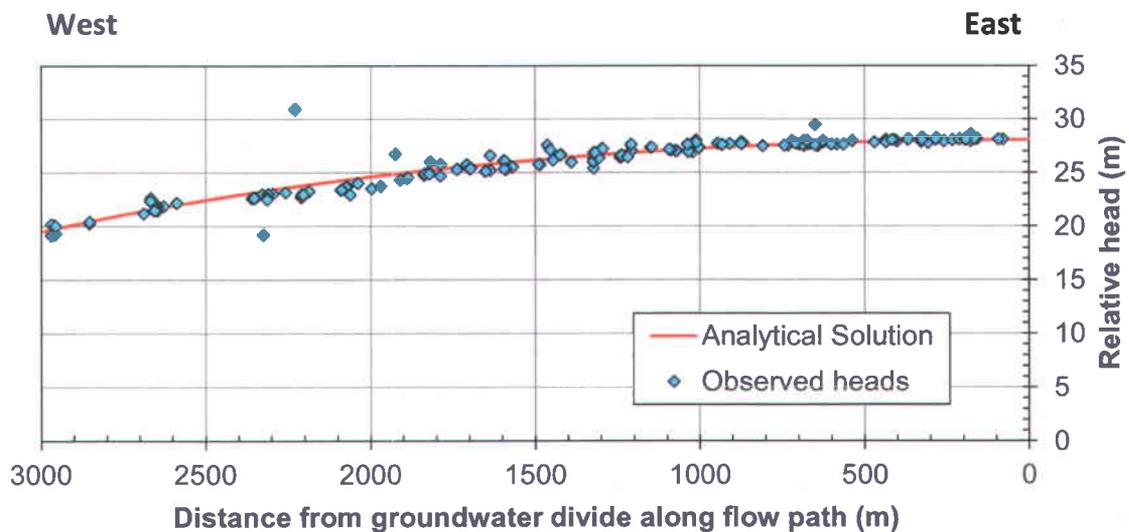


Figure 3.4 Comparison of observed relative heads (w.r.t. the aquifer base) in the regional deltaic aquifer with the analytical solution of Chesnaux et al. (2005). The analytical solution used a $\log K_h$ of -3.6 (K_h in m/s) and a recharge of 300 mm/y (Modified after Lefebvre 2010)

3.5.3 Construction of the kriged model

The kriged model used in this study is the same as that of Ouellon et al. (2008). It was built by using HF proportions over 5 m intervals from borehole logs. These proportions were then distributed over the whole model domain by using a nested kriging method involving the sequential kriging of the proportions of each HF. Finally, K_h and K_v values were estimated from the general means for horizontal and vertical flow in layered media based on the K values of the HF and the proportions of the HF. The final K_h and K_v values were obtained by matching estimates obtained from generalized means to the reference provided by interpolated K_h values from slug tests (Table 2.1). Although the kriged proportions of hydrofacies do provide a heterogeneous K model, the use of HF proportions over 5 m intervals and their interpolation by kriging leads to a smoothing of the actual variations in HF proportions, and thus of K . Consequently, the aim of the second heterogeneous model was to create a spatial distribution of K that would retain the actual variability of this parameter, as discussed in the next section.

3.5.4 Construction of the nested stochastic models

Conventional hydrocarbon reservoir modeling uses stochastic methods because of the need to better represent the connectivity and the uncertainty associated with the possible reserve recovery. These stochastic methods aim at reproducing the modeled spatial statistics (i.e. variograms, high order stats) which, in turn, enable the prediction of a property at one point in the reservoir from observations made at different locations (Doyen 2007).

Depending on the cases, the use of a variogram does not allow a satisfactory reproduction of the structural complexity of the geological model (Hu and Chuginova, 2008). For this reason, multiple point geostatistics (MPG) or high order geostatistics (Mustapha et al., 2008) have been recently developed to reproduce the complex textures. However, these techniques are not solely data driven and require the use of a training image to permit the calculation of the high-order statistics. The training image is like a conceptual model representing geological structures and their connexions in space. These techniques are particularly efficient to compute multiple scenarios of complex geological features. However, they do not allow for generating continuous

variables as K . Hence, the second level of heterogeneity that needs to be computed is the K_h distribution. Following the workflow established by Blouin et al. (2012), a nested two step approach was used in the present study to develop the second heterogeneous HF and K model: in step one, MPG were used to spatially distribute HFs; and in step two, sequential Gaussian simulations (SGS) were used to populate each HF by K_h values (Figure 3.5). Details about the two steps of the workflow are provided in the following subsections.

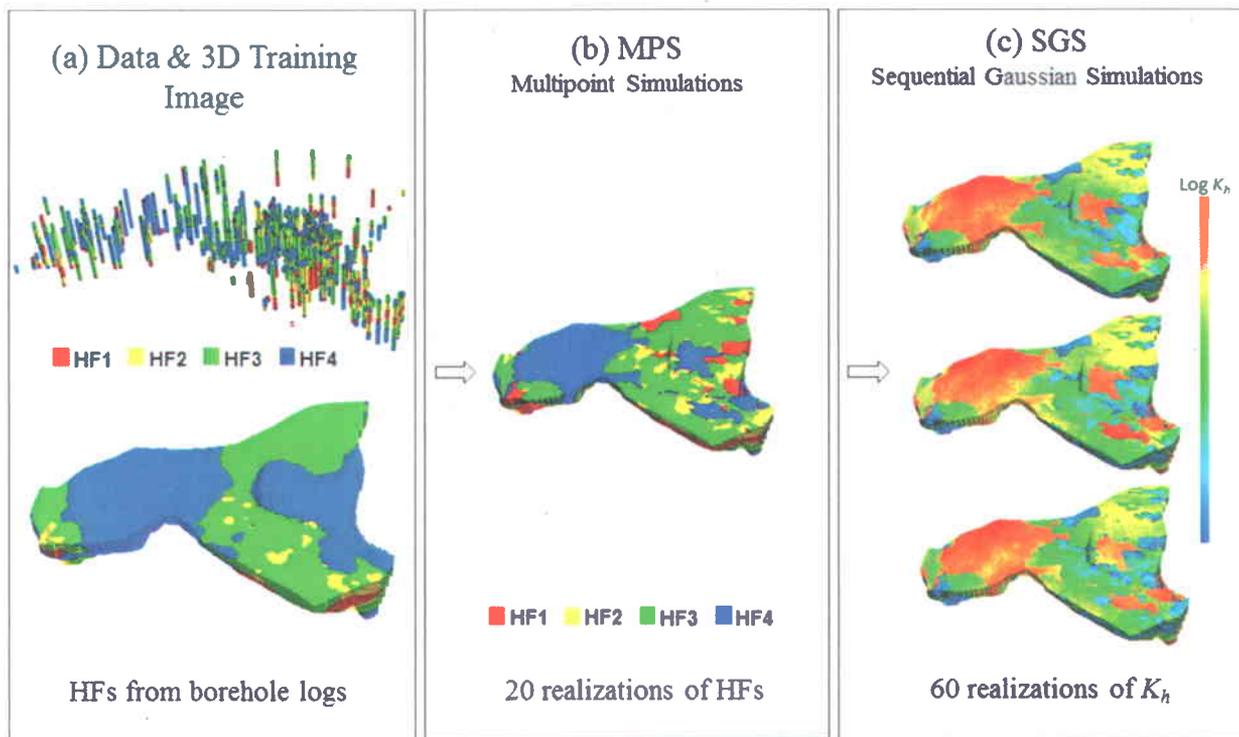


Figure 3.5 Workflow (after Blouin et al. 2012) used for the development of stochastic heterogeneity models : (a) Hydrofacies data from borehole logs and training image based on highest proportion hydrofacies interpolated by kriging (from Ouellon et al. 2008), (b) example of a realization from multipoint geostatistical (MPG) modeling, (c) examples of multiple realizations of K values for the HF by sequential Gaussian simulation (SGS) for a given MPG realization.

Step1: HF distribution

First introduced by Guardiano and Srivastava (1993) and later by Strebelle and Journel (2000), MPG is a pixel-based simulation algorithm allowing the calculation of the probability of occurrence of a categorical property (such as HF) at every point of a simulation grid based on the spatial correlation of several points.

Unlike other geostatistical methods involving two-point statistics, MPG uses both measured data and a training image (TI) to extract high order statistics (Strebelle 2001) that are used as structural support for the geostatistical simulation. The training image is a generic representation of the geological setting of the aquifer.

Data preparation:

For the present study, the proportions of HF from Ouellon et al. (2008) were taken as a base for the construction of the training image. The dominant HF was assigned to each node of the simulation grid in order to categorize the variable of interest and obtain a categorical training image. This image is intentionally not very heterogeneous but it reflects the deltaic trend of sedimentation of the aquifer where the coarser hydrofacies HF4 dominates to the west and finer hydrofacies HF3 and HF2 are more important to the east, while the finer HF1 associated with the silty aquitard is restricted to the east (Figure 3.5a) (for details see also Ouellon et al. 2008).

By creating a TI based on HF proportions, which are derived from wells data, a double a priori is brought: on hydraulic properties and structural distribution of HF, because HF definition is based both on the K_h distributions and geological descriptions from borehole logs.

Input data for MPG are the initial individual HF descriptions from borehole logs assigned to specific intervals (Figure 3.5a) and the TI. The HF descriptions are those taken before the calculation of HF proportions on a 5 m interval done by Ouellon et al. (2008) for the construction of the previous HF and K heterogeneity model.

Parameters used in the MPG algorithm:

To simulate a HF value in a given voxel of the geostatistical simulation grid, the neighborhood of this point is first considered using a 3D template. Three template sizes (in meters, respectively in the X, Y and Z direction) were used to enable the reproduction of the heterogeneity scale: a coarse (600 x 600 x 4), a medium (450 x 450 x 3), and a small template (300 x 300 x 2).

Previously, the same templates were used to scan the TI in order to record multiple-point statistics in the form of tree lists using the Impala algorithm (Straubhaar et al., 2011) of Isatis® software. The neighborhood of the point is then researched among these lists. This step enables building the conditional probability distribution function (CPDF) within which the HF probability is extracted and assigned to the simulation grid. Simulated values are then integrated to the data following the classic process of sequential simulations.

The choice of the dimensions of the XYZ templates used to scan the TI is particularly important: an HF simulation result from templates which are too small will possess a spatial heterogeneity artificially high as large structures will not have been extracted in the statistics.

At the end of this first simulation step, 20 heterogeneous HF models from HF realizations by MPG were obtained (Figure 3.5b) and will serve as a spatial framework for the second level of heterogeneity distribution of K within the HFs.

Step2: K_h distribution

In this second step, sequential Gaussian simulation (SGS) was used to assign K_h values in every cell of the simulation grid. Under the Gaussian assumption, SGS is a well-known simulation technique that permits computing multiple realizations of continuous properties (Srivastava, 1994). SGS reproduces input data and allows recovery of the modeled variogram as well as the histogram (distribution).

Using the $\log_{10}(K)$ values measured at wells and the distribution and variograms of K_h for each HF (Figure 3.5c), K_h simulations are calculated within each HF. The simulation grid dimensions are 200 x 150 x 60 (cells dimensions are 25 x 25 x 0.5 m).

For each of the four HF, two experimental variograms of K_h (vertical and horizontal representing the main axes of the K anisotropy) are calculated and modeled (Table 3.2). Since it defines the spatial correlation of K_h , the choice of the variogram model is a key point for the modeling of K_h heterogeneity. In the present study, spherical models were found to provide the better fit of experimental variograms.

Table 3.2 Summary of variography results for K_h for each hydrofacies

	<i>Horizontal</i>			<i>Vertical</i>		
	Nugget (-)	Sill + Nugget (-)	Range (m)	Nugget (-)	Sill + Nugget (-)	Range (m)
HF1	0.005	0.8	265	0.005	0.8	3
HF2	0.02	0.245	250	0.02	0.245	4
HF3	0.02	0.25	800	0.02	0.25	25
HF4	0.01	0.16	1500	0.01	0.16	24

Main steps of SGS:

A voxel is randomly chosen in the simulation grid. Using measured and previously simulated K values and the variogram corresponding to the HF in which the voxel belongs, the conditional mean and variance are computed. Afterwards, a value of $\log K_h$ is sampled randomly in the conditionnal CDF and is assigned to the corresponding voxel in the simulation grid. The simulation ends when all the grid voxels are visited once.

In this second step, three K_h realizations were computed for each of the twenty HF realizations, thus providing a total of 66 equiprobable geostatistical models of K_h (Figure 3.5c).

To get K_v values, relations defining vertical anisotropy for each of the four HF were used with $\log(K_h/K_v)$ respectively equal to 0, 1, 2 and 3 for HF4, HF3, HF2 and HF1 (Ouellon et al. 2008). The number of realizations was arbitrarily chosen, but it is high enough to cover the variability of the spatial distribution and a relatively easy management.

In the next section, the impact of the two heterogeneous K models, compared to the homogeneous model, will be evaluated by the numerical modeling of flow and mass transport.

3.6 Groundwater Flow Model Development

At the scale of an aquifer, the heterogeneity of geological materials leads to variations of hydraulic conductivity K (Dagan 1989). In order to assess the impact of different heterogeneous spatial K distributions, groundwater flow simulations were carried out on all our numerical K models. A numerical flow grid was computed which was then assigned the three spatial distributions of K described in the previous section: a homogeneous K distribution and two heterogeneous K distributions, respectively, based on the kriged proportions of hydrofacies (Ouillon et al. 2008) and the geostatistical simulation of hydrofacies with MPG followed by SGS simulations of K . The numerical model was developed using the FEFLOW model, which uses triangular prisms (Engesgaard and Molson 1998, Molson and Frind 2005 and 2009), allowing an accurate reproduction of the complex geometry of the aquifer (e.g. better representation of sloping layers and anisotropy (Holzbecher and Sorek 2005)). The three models were built using the same numerical grid which follows the units of the 3D geological model developed by Boutin (2004). The grid dimensions and the discretization are also the same as used by Ouillon et al. (2008). Using the same numerical model with identical numerical grids allows the comparison of the impact of changes in the representation of K heterogeneity in the numerical model, without effects related to changes in the numerical model itself. Figure 3.6 shows the numerical grid, which has over a million elements distributed on 29 layers, with individual triangular cells with sides between 10 m and 50 m. As mentioned previously, the heterogeneity study is focused on the deltaic sediments. The hydraulic properties of sediments below the deltaic sediments are kept exactly the same for all heterogeneity models using an average K_h and K_v combination for each unit (Ouillon et al. 2010).

Table 3.3 Hydraulic conductivity of glaciomarine and diamicton sediments used in all numerical models

	Glaciomarine Sediments	Diamictions
K_h (m/s)	$1,3.10^{-03} < K_h < 5,0.10^{-08}$	$1,9.10^{-5}$
K_v (m/s)	$1,3.10^{-03} < K_v < 3,1.10^{-09}$	$1,9.10^{-6}$

For the same reason that an identical grid was used for the three numerical models, the boundary conditions applied to these models were also the same (Table 3.3 and Figure 3.6). Natural limits, such as rivers and streamlines, were used to design the limits of the 2D numerical grid. Boundary conditions were adjusted using piezometric maps from detailed environmental characterizations (Ouillon et al. 2010). The flow regime is steady state for all three numerical models.

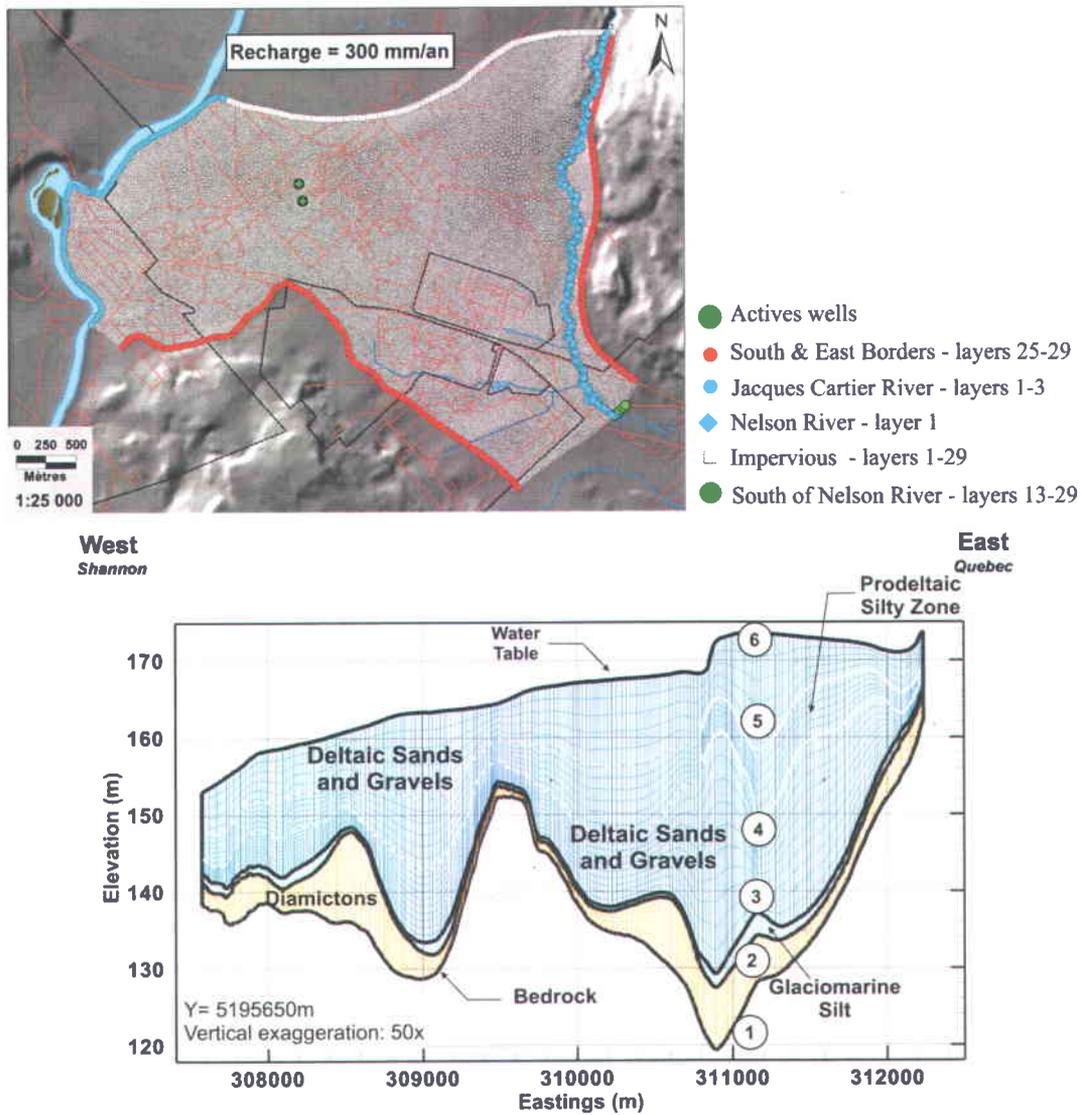


Figure 3.6

Numerical grid : (a) plan view of the grid and boundary conditions, and (b) section view of model layers closely following the limits of geological units, with numbers referring to the interpolated surfaces between units that were used to guide the assignment of model layers (1: top of bedrock; 2: top of diamicton aquifer; 3: top of glaciomarine aquitard; 4: base of prodeltaic aquitard; 5: top of prodeltaic aquitard; 6: water table (after Ouellon et al. 2010)

Table 3.4 Flow boundary conditions for all three numerical models (Ouellon et al. 2010)

<i>Boundary Condition</i>	<i>Type</i>	<i>Layers</i>	<i>Values</i>
Jacques Cartier River	1 st (Dirichlet)	1 to 3	151-160 m
Nelson River	1 st (Dirichlet)	1	177-167 m
South of Nelson River	1 st (Dirichlet)	13 to 29	164 m
South and east borders	1 st (Dirichlet)	25 to 29	159.5-171 and 167-177
Wells P4 and P7	4 th (Well)	12 to 14 and 9 to 20	435 and 1780 m ³ /d
Recharge	2 nd (Neuman)	1	300 mm/year
Model Base and Others limits	-	-	Impervious

3.7 Effects of Heterogeneity on Groundwater Flow

This section describes the effects of the level of heterogeneity of simulated fluid flow for three models: homogeneous K model, kriged K model and one stochastic K model. First, the effect on heads is analyzed via the classic calibration of simulated versus measured heads. Then, the effect of heterogeneity on flow paths is assessed by the comparison of the simulated piezometric maps obtained for the three models. The impact on flow as well as kinematic ages is also presented using particule tracking along the ‘north flow path’. Finally, a connectivity analysis of the heterogeneous models is carried out.

3.7.1 Impacts on Heads

Observed heads were compared to simulated heads for each K model (Figure 3.7). Generally, all three models with different levels of K heterogeneity produced a good fit of simulated versus observed heads. Since the kriged K model was used to adjust boundary conditions, we assumed that this model would produce the best fit. Nevertheless, Figure 3.7b and 3.7c show that some simulated heads, from the western part of the deltaic aquifer, are underestimated by the two heterogeneous models.

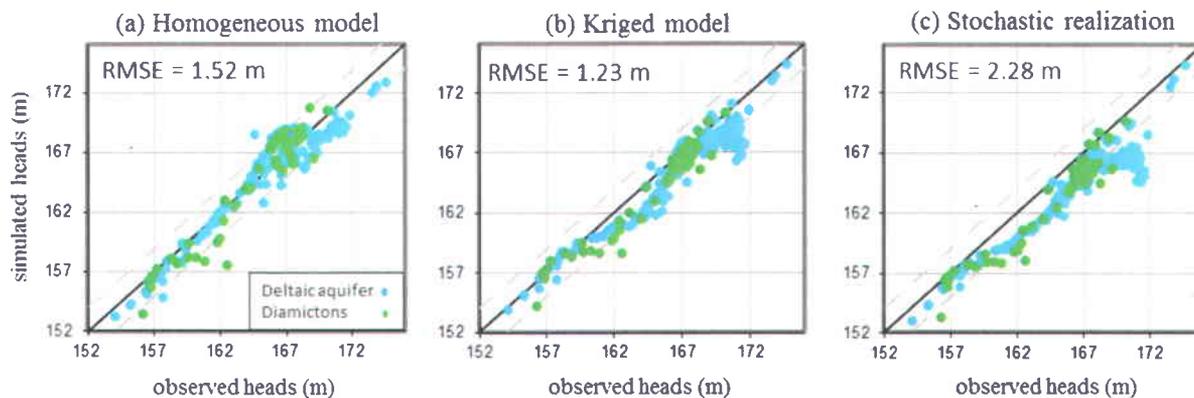


Figure 3.7 Observed heads from piezometric measurements versus simulated heads and root mean square error (RMSE) for (a) the homogeneous model, (b) the kriged heterogeneous model and (c) one realization of a stochastic heterogeneous model.

This might be the result of (1) too high K_h values in the deltaic complex or (2) too low K_v values below the deltaic sediments (glaciomarine and proglacial sediments). Since the homogeneous K model does not present such a bias and has the same K definition of underlying units, this is an argument for a small overestimation of K_h in the deltaic aquifer. The same bias is found in the majority of the stochastic K simulations. This could be due to certain choices in the HF and K distribution methods (e.g. too high variogram ranges for the SGS or too high representation of the coarse HF in that zone of the Training Image, TI).

In order to have a first discrimination of all simulations (especially the 60 stochastic realizations), the RMS error was calculated on the calibration. The large number of water level measurements and their good spatial distribution in the aquifer insure a representative definition of the flow regime. Figure 3.8 shows the value of the RMS error for all flow simulations. The kriged K model gives the best result (RMSE = 1.23 m), which was expected because boundary conditions were adjusted for the kriged K model and then maintained for other models. Nevertheless, the homogeneous (RMS = 1.52 m) and stochastic K models ($1.48 \text{ m} < \text{RMSE} < 3.12 \text{ m}$) also show relatively low RMS error, showing that they can reproduce observed heads satisfactorily. The mean of the stochastic simulations was also calculated (Figure 3.8). The resulting simulation shows a bigger error than most of the realizations.

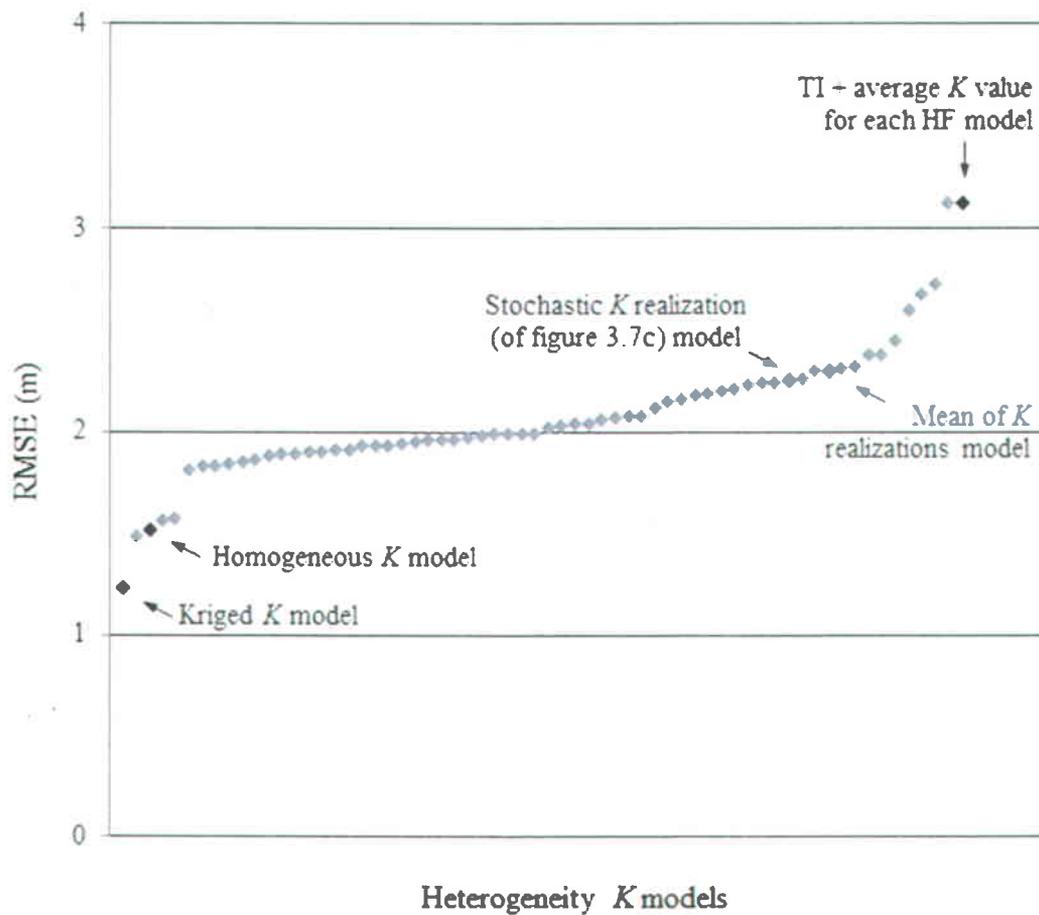


Figure 3.8 Root Mean Square Error (m) between observed and simulated heads for all numerical heterogeneity models

In order to test if the TI is representative of the HF and K distribution, the mean K value of each HF was assigned to each HF zone of the TI. This simulation led to a large RMS error (exceeding 3 m). This could indicate that the TI used as a basis for stochastic simulations may not have been an ideal initial conceptual representation of the spatial distribution of HF in the aquifer. However, that initial “bias” was partly corrected by the simulations of HF and K that provided a better fit to hydraulic heads using the spatial distribution of K from stochastic simulations.

3.7.2 Impacts on Groundwater Flow

Figure 3.9 shows the measured piezometric map (Ouillon et al. 2010) and Figure 3.10 shows that the simulated hydraulic heads from the three K models roughly reproduce the general flow pattern defined by measured hydraulic heads. The presented stochastic piezometric map is actually quite representative of the behavior of all stochastic K models.

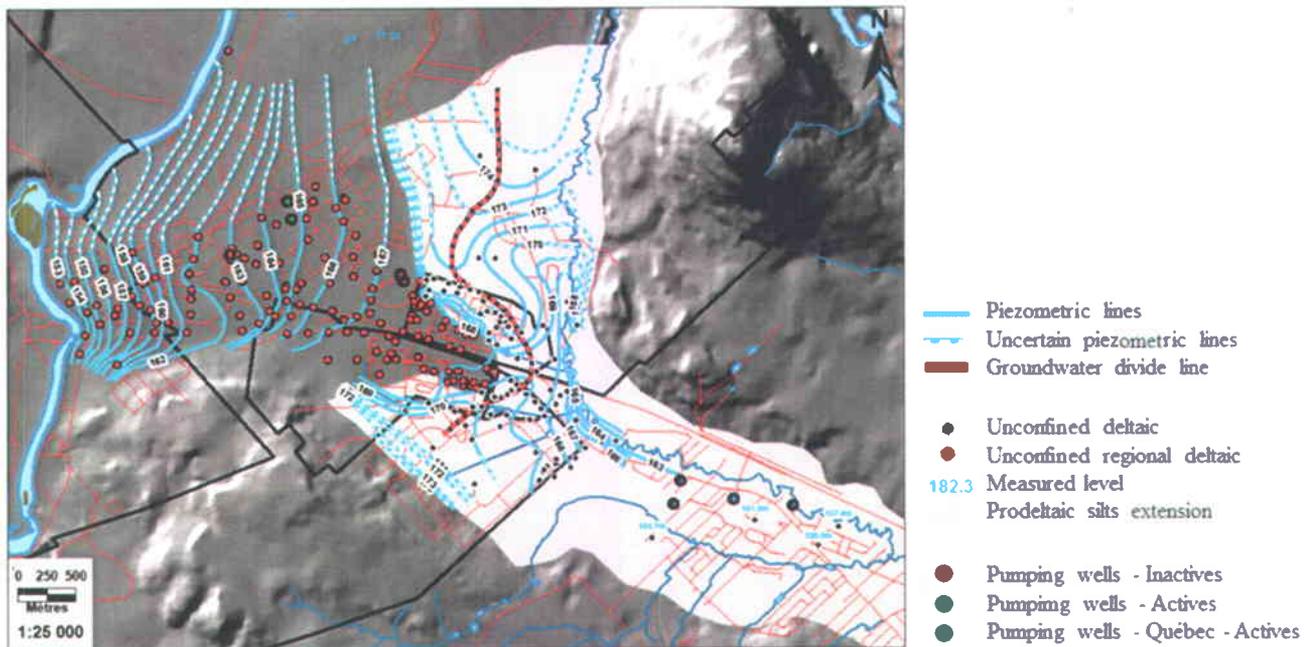
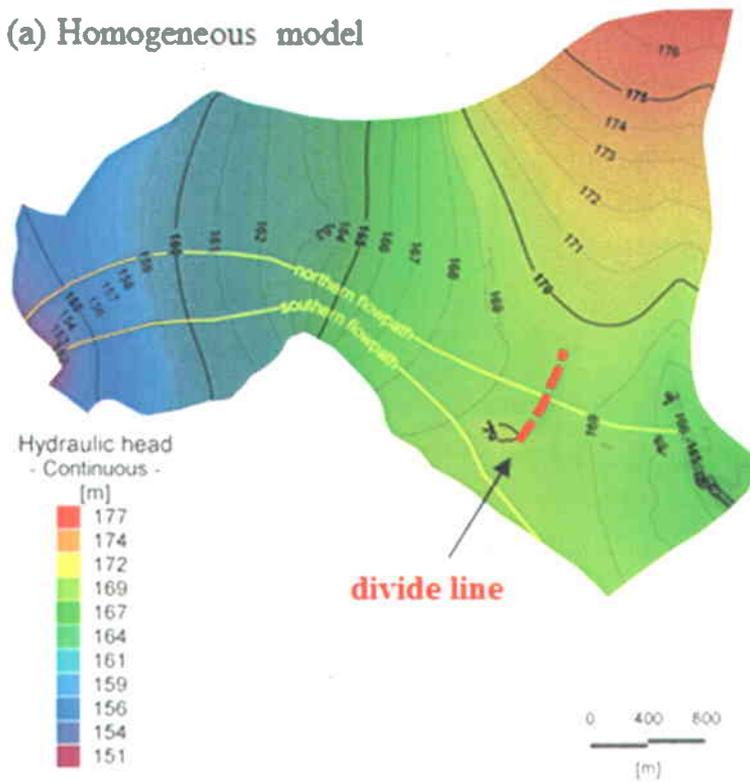
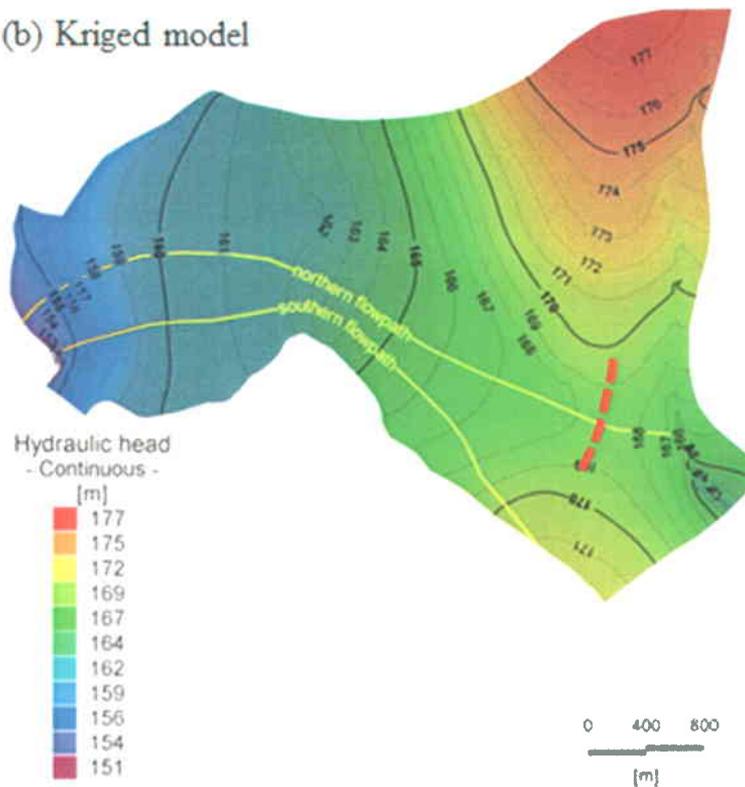


Figure 3.9 Observed water table of the unconfined deltaic aquifer (from Ouillon et al., 2010)

(a) Homogeneous model



(b) Kriged model



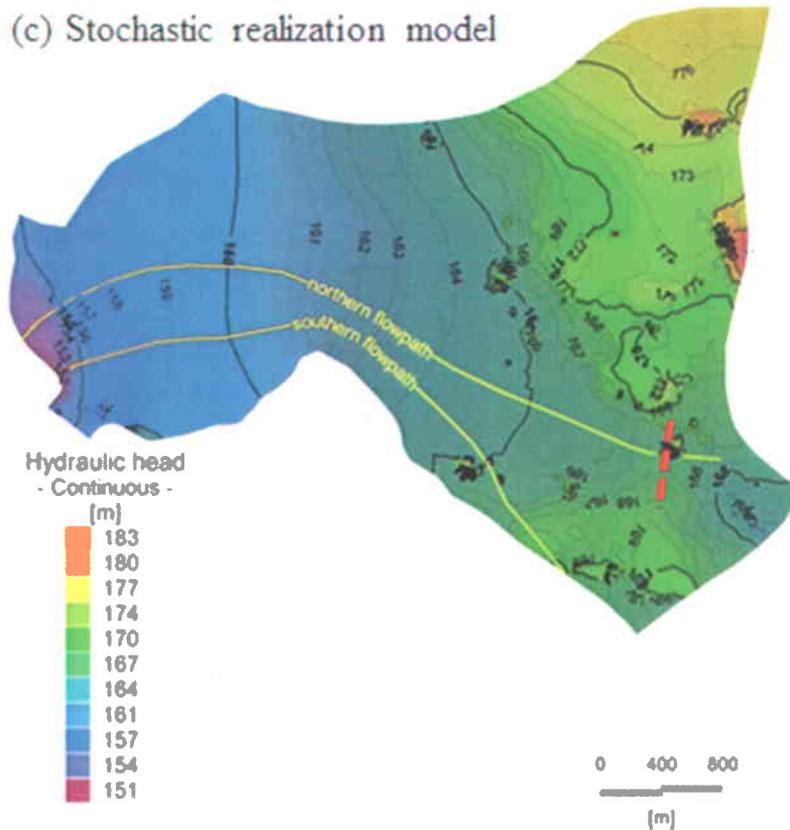


Figure 3.10 Simulated water table for the (a) homogeneous model, (b) the kriged heterogeneous model, and (c) one of the stochastic heterogeneous models.

Each model presents the same general flow orientation from east to west. There is also, in each case, the presence of a singularity point in the eastern part of the aquifer towards which water converges from the south and north which then diverges to the east and west. The groundwater divide line corresponding to a convergence and divergence limit is represented by a red dashed line on the piezometric maps of Figure 3.10. Compared to field measurements (Ouillon et al. 2010), only the kriged K model presents the appropriate location of the water divide line. Once again, boundary conditions were especially adjusted for this model in order to obtain the exact location of the groundwater divide and the singularity point.

The flow pattern tends to be smoother for the kriged K model and the homogeneous model than for the stochastic K model, which has irregular piezometric lines. These irregular piezometric

lines in the stochastic K models are induced by the higher level of K heterogeneity, which leads to modifications of flow directions (Freeze and Cherry 1979). By looking at the piezometric maps, one can see that hydraulic gradients are, on the whole, quite similar for the three models. The ranges of head values are almost identical for the kriged and the homogeneous K models, whereas the stochastic model presents a higher level of piezometric values. These higher heads are localized in restricted small areas of the eastern part of the aquifer and are produced by locally high K_v values on the surface of the water table.

3.7.3 Impacts on Kinematic Ages

Kinematic Ages

Advective groundwater ages were calculated using particle tracking for the homogeneous and heterogeneous models. Figure 3.15 represents vertical cross-sections oriented west to east. These results were obtained by releasing closely spaced particles on the water table (top model slice) along the north flowline shown in Figure 3.10. The particle colors indicate their age (or residence time) on a scale from zero (in blue) to 55 years (in red). Since the deltaic aquifer has a significant recharge of 300 mm/year and is quite permeable, flow is relatively fast and groundwater residence times are mostly within 50 years, which is ideal for using tritium-helium groundwater ages.

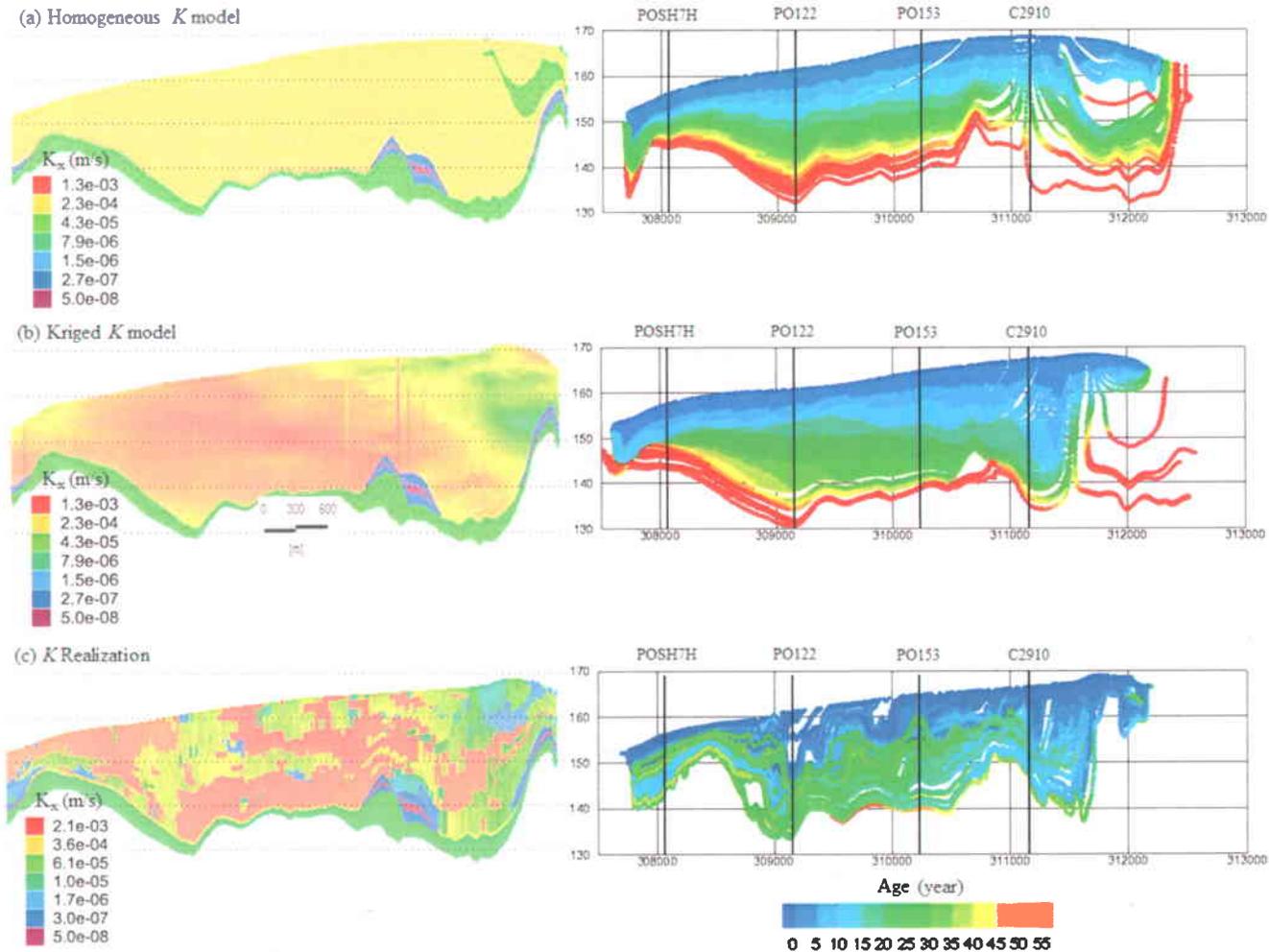


Figure 3.11 Spatial distribution of K_h (left) and advective groundwater ages obtained from particle tracking (right) for (a) the homogeneous and (b) heterogeneous models and (c) one realization of K . The figures represent vertical cross-sections oriented west to east along the north flow path.

Comparing the three sections, it can be seen that the K distribution has a significant impact on flow as well as the distribution of ages. The groundwater divide to the east of the sector is not in the same location for the homogeneous and the two heterogeneous models. The presence of more permeable materials in the homogeneous model in the eastern part of the system leads to faster initial flow close to the divide, which significantly changes the overall flowline directions, compared to the heterogeneous models. However, particle tracks for the heterogeneous models are more irregular due to the variations in K values; there is thus a certain “dispersion” effect on ages along particle tracks, even though the transport process is advective.

In the lower part of the aquifer, particle ages are older for the homogeneous and the kriged model. These older ages – above the measurable range of the $^3H/^3He$ methods – come from the vertical infiltration (because of low vertical gradients of K) of water in the recharge area, and which reach the Jacques Cartier River by flow near the base of the aquifer. For the stochastic model, high K channel (with K_h value around 2.1×10^{-3} m/s) in the center of the section pulls particles eastward, inducing deep young ages. Compared with the homogeneous and the kriged model, particle tracks for the stochastic section are more heterogeneous with some disturbances in the expected vertical distribution of age. Transitions in particle ages are also more abrupt due to important changes of velocity.

In section 3.8.2, tracking ages for the three models are also compared along a vertical section where several observation wells with measured tritium-helium ages are available.

3.7.4 Connectivity Analysis

Preferential flow paths can be important for the migration of contaminants, thus heterogeneous aquifer models should allow the identification of representative highly connected high permeability zones. In order to evaluate the representation of the lateral and vertical connectivity of the deltaic aquifer provided by the heterogeneous K models, a connectivity analysis was thus performed (Moyen and Doyen 2009; Mc Lennan and Deutsch 2005; Renard and Allard 2013). The aquifer volume with a high hydraulic conductivity above $K_h = 10^{-3}$ m/s was extracted for each stochastic K model. Then, according to grid faces of the geostatistical simulation, the connected

volume was compiled as a percentage of the total deltaic volume. The choice of $K_h=10^{-3}$ m/s as a threshold corresponds to materials generally considered as having a high K . It also corresponds to the 75th percentile of the K_h histogram for the deltaic aquifer. Figure 3.11 shows that for the majority of stochastic realizations, more than 20% of the deltaic aquifer is connected and may thus provide a preferential flow and contaminant migration path. Figure 3.11 also shows that the Kriged K model presents a smaller connected volume percentage (11% of the deltaic aquifer). In fact, the connectivity analysis was made on the highest values of K_h . Since the Kriging method tends to narrow the distribution of K around the mean value, the cell number having a conductivity value above the threshold is smaller than for the stochastic realizations.

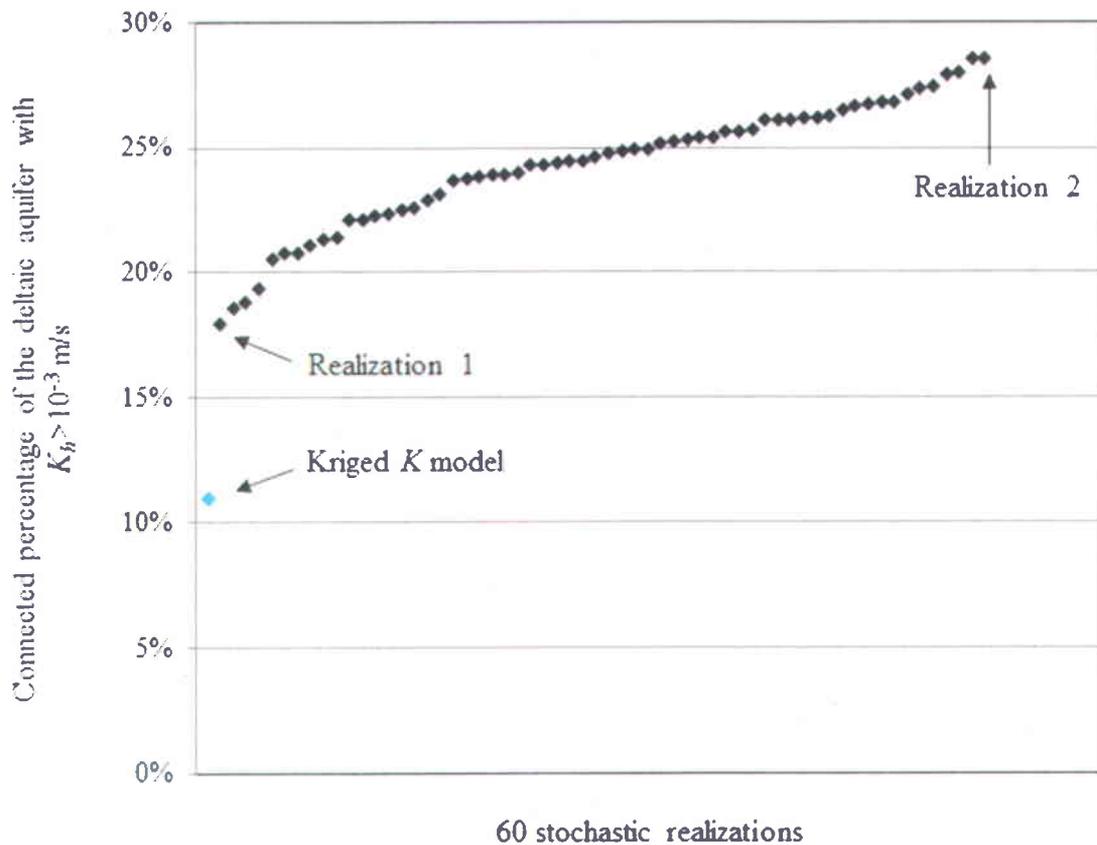
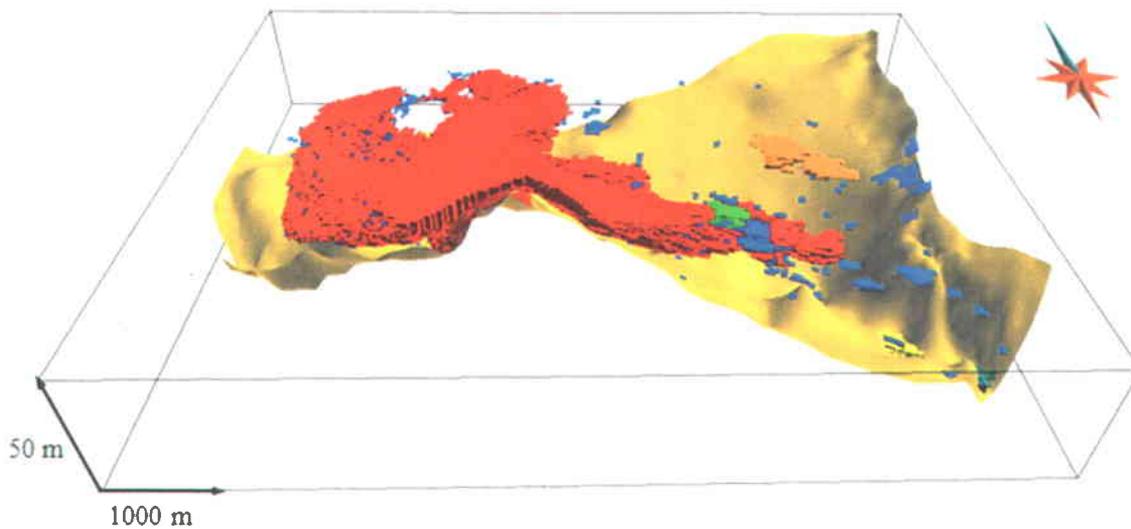


Figure 3.12 Connected percentage (using grid face connection) of the delatic aquifer with $K_h > 10^{-3}$ m/s for the 60 stochastic realizations and for the Kriged K model. Realizations 1 and 2 are represented in the Figure 3.12.

This high K volume is located in the south part of the deltaic aquifer (Figure 3.12), and it extends in an east-west direction. This is quite significant, as this zone connects the recharge area (east) to the outflow area (west) via a sector where source zones are located (Figure 3.1). Indeed, before running flow simulations, we can assume that this high K volume will have high flow velocity, and this could also lead to a prevalence of advective transport.

(a) Kriged K model



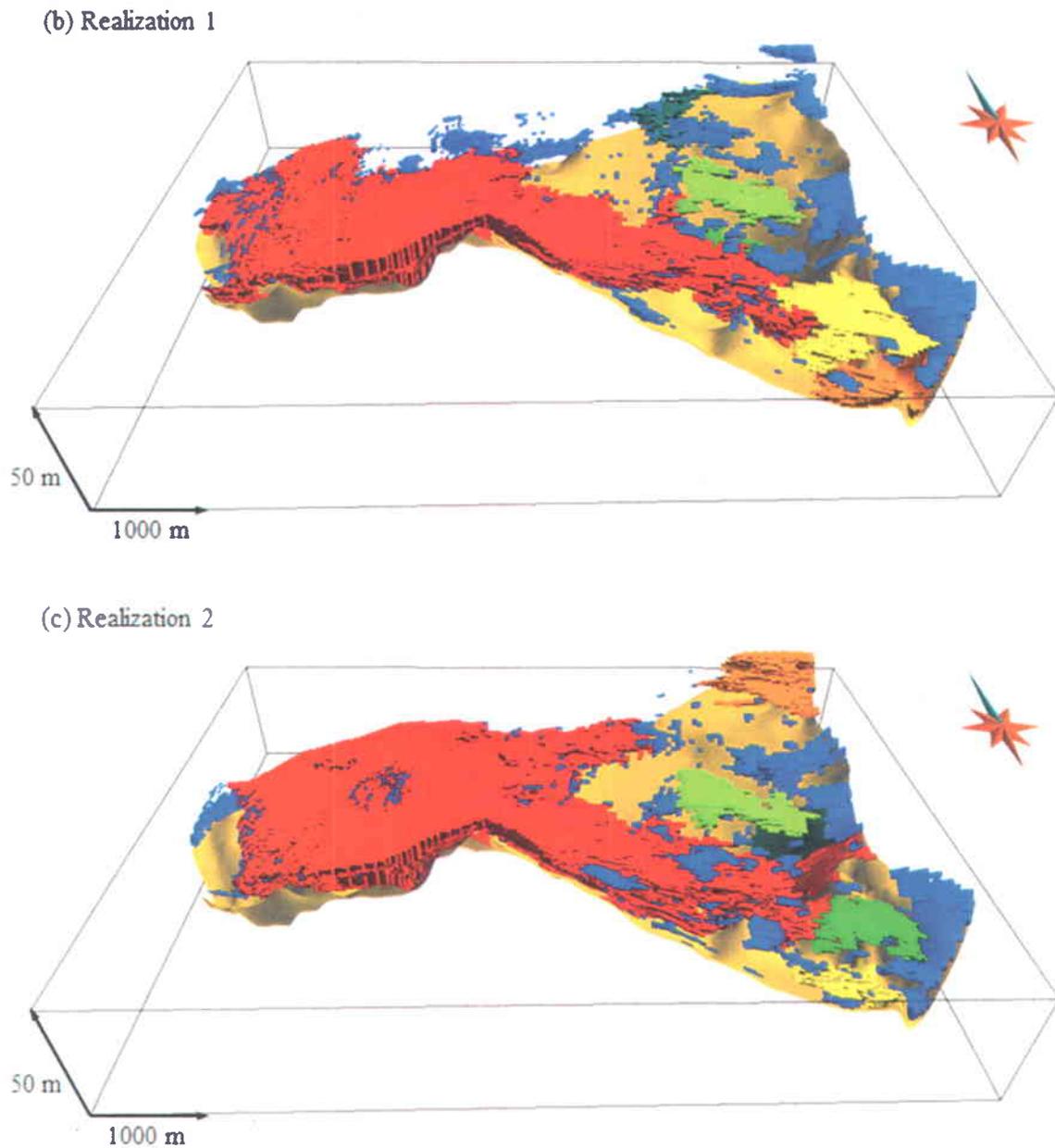


Figure 3.13 Representation of the connected volumes (or geobodies) of the deltaic aquifer using face connection of the simulation grid. Colors represent different geobody volumes. Red represents the highest geobody volume for (a) the Kriged K model, (b) the Realization 1 and (c) the Realization 2 - respectively the smallest (18%) and the highest (29%) connected percentage of the deltaic aquifer. The yellow surface represents the bottom of the deltaic aquifer.

Since the connected high K volume seems to be quite the same for all stochastic simulations, and roughly located in the same area, it appears the stochastic modeling consistently produces limited K heterogeneity in this part of the model. In order to differentiate more precisely the K models, mass transport modeling is carried out in the next section.

3.8 Effects of Heterogeneity on Mass Transport

In the previous section, it was shown that the general groundwater flow pattern was roughly preserved for the homogeneous and the two heterogeneous models. So, it is possible to conclude that the homogeneous, kriged and stochastic K models all reproduce large-scale hydraulic conditions of the aquifer controlling flow, which in the present case can be inferred to be transmissivity (T in m^2/s) ($T=K \cdot b$, where b [m] is the saturated aquifer thickness) and boundary conditions. The global velocity field of the aquifer is also preserved in these models since, in the conditions of the Valcartier deltaic aquifer, groundwater velocity depends mostly on recharge and porosity, which are identical for the three models. Using the analytical solution of Chesnaux et al. (2005) that was used to produce Figure 3.4, Lefebvre (2010) showed that velocity is not sensitive to hydraulic conductivity in the Valcartier deltaic aquifer, but rather depends on recharge and porosity, which was derived independently in the case of recharge (300 mm/y) (Ouillon et al. 2010, Lefebvre et al. 2011) and was validated using tritium-helium groundwater ages in the case of porosity (35%) (Murphy et al. 2011).

In order to test the dispersive effects of heterogeneous K fields at a smaller scale, transport simulations were carried out. Indeed, as noted by Bredehoeft (2005), transport introduces quantitative estimates of porosity and dispersivity that can provide better insights into the actual mechanisms of groundwater flow at a site. In this study, groundwater age and a TCE plume serve as indicators of the dispersive effects of K heterogeneity, which can be used to assess how representative are the results obtained from numerical modeling. Numerical simulations were made with FEFLOW using two approaches: 1) advective transport using particle tracking with

the steady state flow fields provided by the three numerical models, so as to assess the dispersive effects of heterogeneity on advective transport and groundwater age, and 2) transient advective-dispersive transport simulations of mass (TCE) and groundwater age, so as to obtain values of “small scale” dispersivity that would allow the match of simulated and observed TCE and age distributions. For the advective-dispersive simulations, a simulation period of 2000 years was chosen to ensure steady transport conditions in the aquifer, for both TCE plume and age mass transport. Results obtained from advective transport using particle tracking and those provided by advective-dispersive mass transport were also compared.

Gelhar and Axness (1983) consider the hydrodynamic dispersion D as an expression of uncertainty due to local-scale heterogeneity. The dispersion principally depends on the average linear velocity (scale dependent) times a property of the medium, called dispersivity α (Domenico and Schwartz, 1998), and in simplified 1D form can be expressed as:

$$D = \alpha_i \cdot v_i + D^*$$

with, α_i : dispersivity in the i direction (m); v_i : average linear velocity in the i direction (m/s); D^* : diffusion coefficient (m^2/s) which can be neglected in our study because advection is generally large. The dispersivity acting parallel to the principal flow direction is called longitudinal dispersivity (α_L) and the one in the perpendicular direction is called transverse dispersivity (α_T). The advection-dispersion equation (ADE) in 3D used to simulate transport of a dissolved non reactive component mass be written as:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right] - \left[\frac{\partial}{\partial x} (v_x C) + \frac{\partial}{\partial y} (v_y C) + \frac{\partial}{\partial z} (v_z C) \right] = \frac{\partial C}{\partial t}$$

with C : concentration (mg/L); D_x, D_y, D_z : tensor of hydrodynamic dispersion (m^2/s); v_x, v_y, v_z : components of the average velocity (m/s).

Goode (1996) showed that the classic formulation of ADE in 3D can be used jointly with the definition of the mean age A to formulate the following age transport equation (under steady flow conditions the time derivative can be set to zero). The definition of the mean age considers mixing of water in the aquifer.

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial A}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial A}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial A}{\partial z} \right) \right] - \left[\frac{\partial}{\partial x} (v_x A) + \frac{\partial}{\partial y} (v_y A) + \frac{\partial}{\partial z} (v_z A) \right] + 1 = 0$$

with A : mean age (s); D : tensor of hydrodynamic dispersion (m^2/s); v : average velocity (m/s);
 1 : age increment.

The objective the transport modeling is to find, for each heterogeneous model, the dispersive parameters (α_L and α_T) that reproduce the shape of the observed TCE plume and that fit the measured ages. We assume that the homogeneous K model would require larger values of dispersivity than the more heterogeneous ones, since, contrary to heterogeneous models, it does not intrinsically lead to dispersive local variations of the flow field.

The initial longitudinal dispersivity value used for advective-dispersive mass transport modeling was taken from the estimation given by Xu and Eckstein (1995) for scales longer than 3500 m:

$$\alpha_L = 0.83 (\log L_s)^{2.414}$$

Indeed, by taking the length of the plume as the travel distance L_s ($L_s=4000$ m) we find $\alpha_L=7.2$ m. Then, considering both age and TCE transport, α_L was initially fixed to 10 m and α_T to 0.001 m for the homogeneous and the kriged K model. Age and TCE transport simulations were not possible on the stochastic realizations because high K variations lead to steep concentration gradients requiring a finer spatial discretization to enable the numerical model convergence.

Since the setup of boundary conditions is different, age and TCE transport simulations were carried out separately. Age and TCE transport simulations both use a Galerkin finite elements, with no upwinding to avoid numerical dispersion (WASY 2005) and provide the best accuracy (Frind 2009). For the TCE simulations, the locations of the three sources were taken from Ouillon et al. (2010) (shown on Figure 3.1).

Due to the spatial and temporal continuity of the TCE plume, TCE sources were considered permanent. A Dirichlet condition was applied with a fixed concentration $C_0=100$ mg/L for the three sources. This concentration value was arbitrarily chosen but still provides a practical evaluation of the concentration range. At all outflows (Jacques Cartier River and Nelson River), a Neumann-type zero-gradient condition was applied to simulate a free exit boundary of the

advection-dispersion equation (Frind 1988). For age simulations, Dirichlet conditions were applied at all inflow boundaries (Molson and Frind 2011) with age $A=0$ on the recharge areas and an imposed age $A=50$ years at the base of the southern and eastern borders to simulate the presence of an older water inflow (validated by geochemical and tritium-helium data, Murphy et al. 2010).

The temporal stability criterion was self-ensured by the FEFLOW software using the Forward Adams-Bashforth/Backward Trapezoid rule (AB/TR) time integration scheme. The spatial stability criterion satisfied the Peclet criterion in most cases. Considering that the size of a numerical grid element Δx varies between 10 and 50 m, and since $\Delta x \approx \Delta y \ll \Delta z$, the calculation of the Peclet number can be defined by this 1D approximation (Frind 1989):

$$Pe = \frac{v\Delta x}{\alpha_L} \leq 2$$

With, Pe : Peclet Number; v : velocity (m/s); Δx : spatial discretization (m); α_L : longitudinal dispersivity (m).

First, TCE transport simulation results will be compared to the observed plume; then, age transport simulation results will be compared to measured ages and particle tracking results.

3.8.1 Mass transport validation with observed TCE plume

Systematic changes in dispersivity parameters for numerous (non reactive) mass transport simulations provided values allowing a representative reproduction of the observed TCE plume. For both the homogeneous and kriged heterogeneous model, reasonable simulated plumes were obtained for values of $\alpha_L=10$ m and $\alpha_T=0.001$ m (Figure 3.13).

(a) Interpreted TCE concentration zones of the observed plume

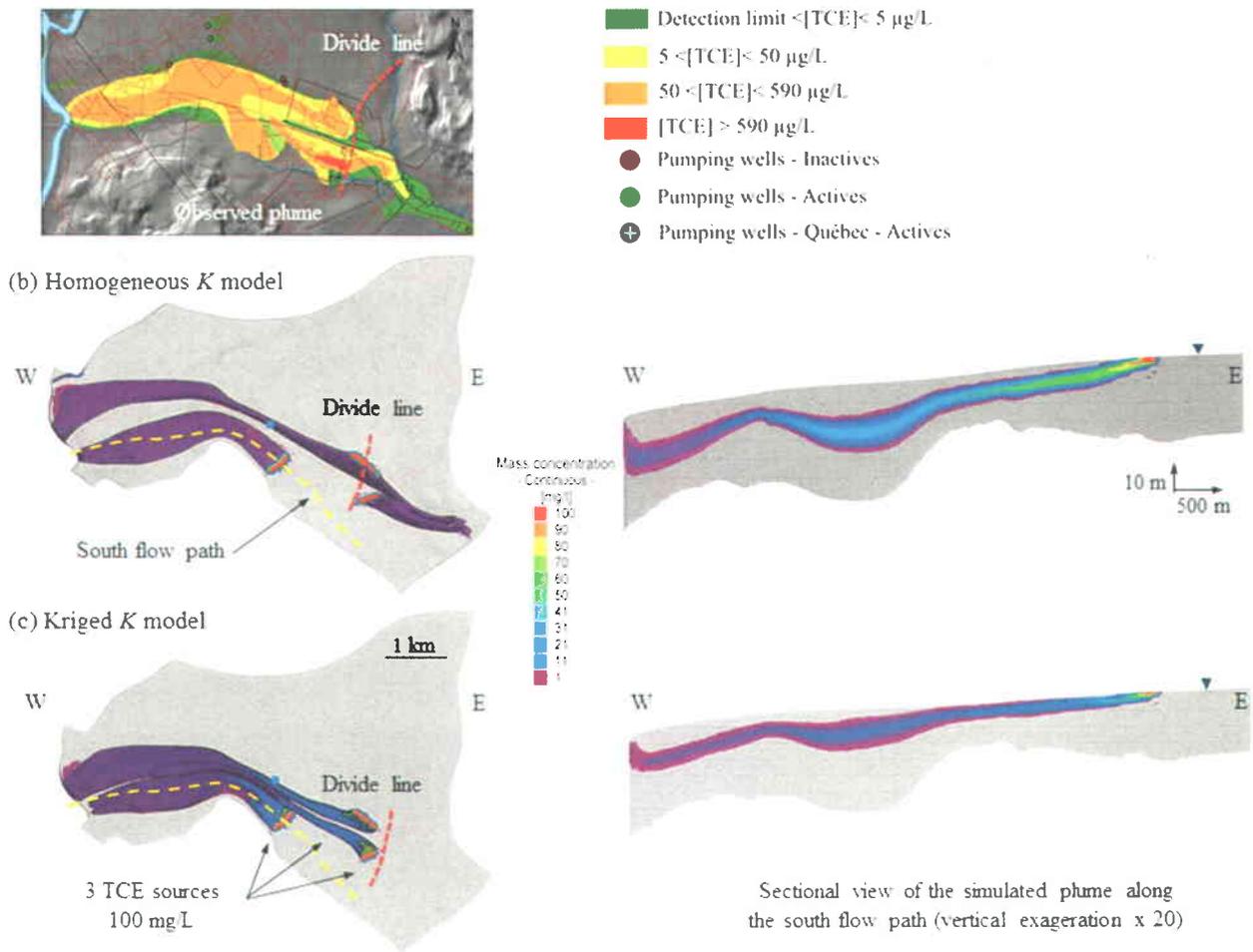


Figure 3.14 Observed TCE plume (a) versus simulated plume for (b) the homogeneous model and (c) the heterogeneous kriged model. Mass migrates to the east in the homogeneous model because it did not reproduce well the location of the groundwater flow divide.

Since only a qualitative comparison of the overall shape of the simulated versus observed plumes was made, the dispersivity values of each model did not consider actual TCE concentrations. Under steady state, in order to avoid an overestimation of α_L , care was taken to avoid simulating upgradient mass migration. Only the spread of mass in map view and in cross-section were used to select representative dispersivity values, especially for transverse dispersivity α_T . The low

value of α_T seems to indicate a very low transverse vertical dispersivity. Verifications were also made on mass balance and the convergence of the model for mass transport simulations. The homogeneous model does not reproduce the observed plume as well as the heterogeneous kriged model because the inaccurate location of the groundwater divide in the homogeneous model leads to mass transport to the east.

3.8.2 Comparison of Isotopic Ages, Kinematic Ages and Mean Age

Isotopic Ages

Murphy et al. (2011) provide details on the characterization of tritium-helium groundwater ages in the Valcartier aquifer, as well as their use to constrain the numerical model. The ^3H - ^3He dating method was considered a suitable technique for determining the age of Valcartier groundwater for several reasons. As Murphy et al. (2011) mention, the deltaic aquifer is relatively homogeneous in terms of sand composition, without silty layers over most of the aquifer, and groundwater recharge and velocities are sufficiently high so that differential diffusion of ^3He should have minimal impact on the ^3H - ^3He ages, which should approximate advective travel times (Schlosser et al. 1989, Labolle et al. 2006). The availability of a large number of sampling wells at Valcartier allows for selecting wells along two flow paths (north and south flow paths in Figure 3.14).

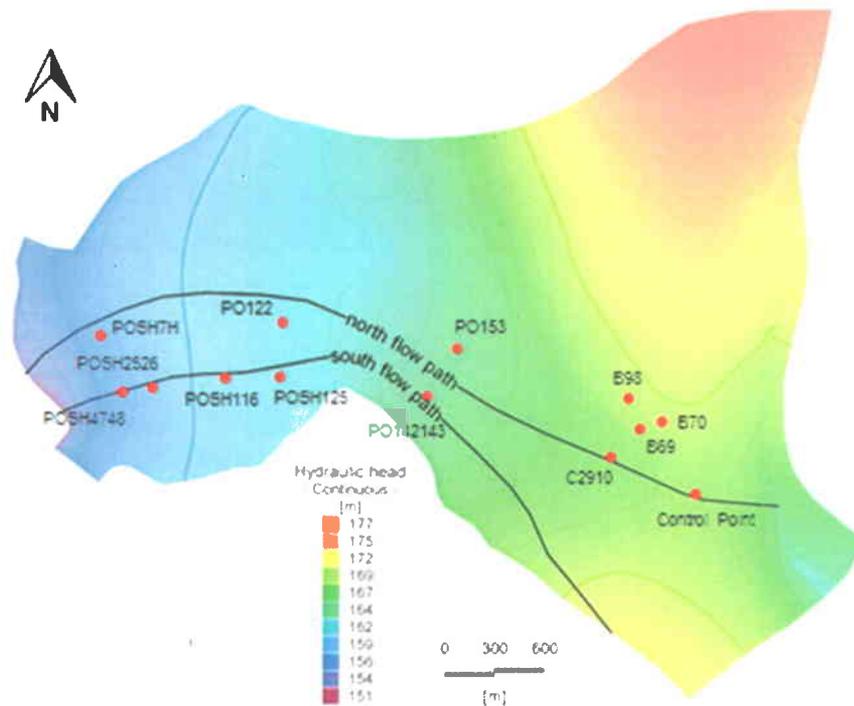


Figure 3.15 Location of observation wells on the north and the south flow path used by Murphy et al. (2011) to characterize tritium-helium groundwater age. The flow paths are shown over the simulated water table using the heterogeneous kriged model.

Kinematic Ages

In the next subsection, tracking ages (presented in section 3.7.3) for the homogeneous and the Kriged models are compared along a vertical section where several observation wells with measured tritium-helium ages are available.

Mean Age and Kinematic Age Comparisons

The graphs of Figure 3.17 show the variation in age versus depth in the homogenous (blue line) and heterogeneous kriged (red line) models. Plain lines represent the ages, as derived by the method of Goode (1996), using identical dispersivity values to those used for the plume ($\alpha_L=10$ m et $\alpha_T=0.001$ m). Dashed lines represent the ages extrapolated from particle tracking profiles. In

the dashed curves, there is a greater inaccuracy due to the use of an interpolating method and to the projection of particle tracking data on a 2D section. This explains the unrealistic behaviour of curves in places in Figures 3.16d and 3.17b, which exhibit very obvious discontinuities at around 20 m and 11 m depth, respectively.

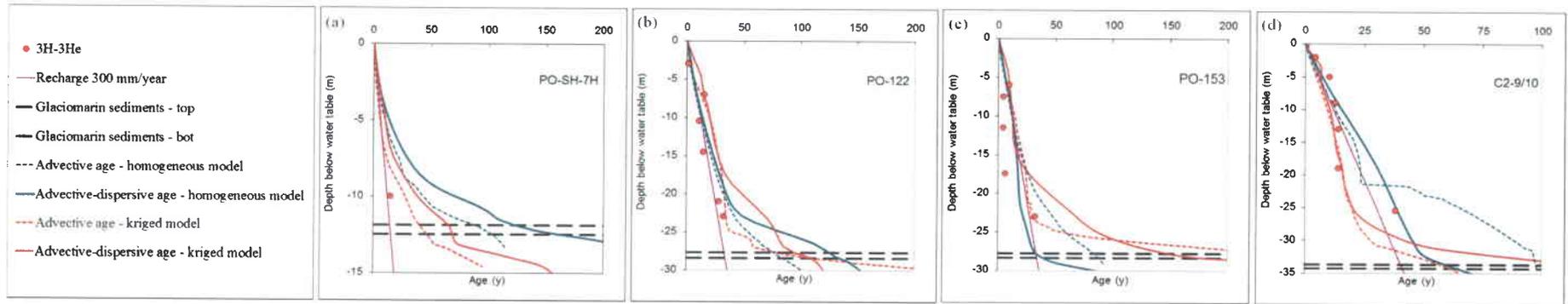


Figure 3.16 (a), (b), (c), and (d) Comparison of advective (from particle tracking), advective-dispersive and isotopic ages versus depth, for the homogeneous and the kriged model, along the north flow path (well locations shown on Figure 3.15). Dispersivities are $\alpha_L=10$ m and $\alpha_T=0.001$ m. Purple lines represent ages for steady uniform vertical recharge of 300 mm/y and for a porosity of 0.35. Black lines represent the interval of glaciomarine sediments below the deltaic aquifer.

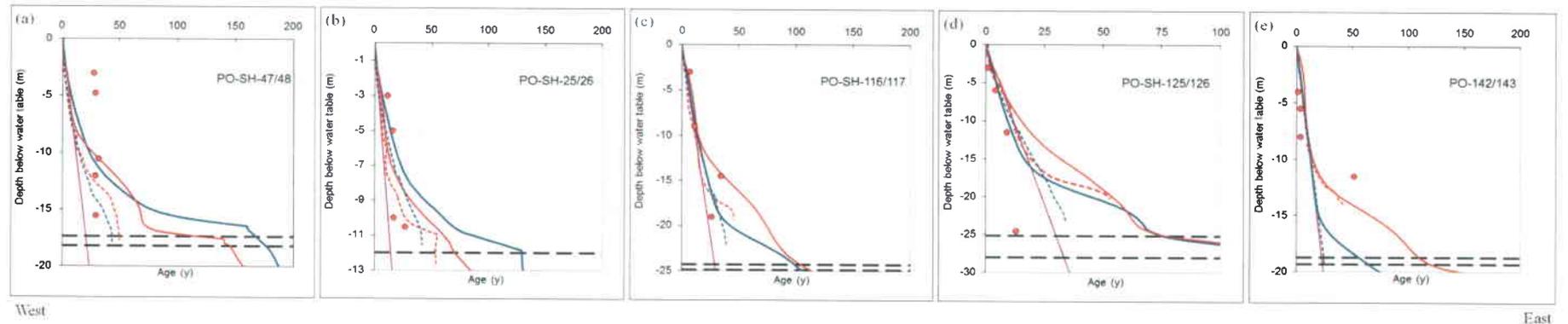


Figure 3.17 (a), (b), (c), (d) and (e) Comparison of advective (from particle tracking), advective-dispersive and isotopic ages versus depth, for the homogeneous and the kriged model, along the south flow path (well locations shown on Figure 3.15). Dispersivities are $\alpha_L=10$ m and $\alpha_T=0.001$ m. Purple lines represent ages for steady uniform vertical recharge of 300 mm/y and for a porosity of 0.35. Black lines represent the interval of glaciomarine sediments below the deltaic aquifer.

The four curves are very close in the upper part of the aquifer : the corresponding correlation depth varies according to the width of the flow section. In the upper part of the aquifer, the increase of ages is quite regular and follows the purple line which represents the ages that would be obtained for a steady uniform vertical recharge of 300 mm/y and for a porosity of 0.35. This illustrates the low dispersive effect linked to the proximity of the recharge area (lower velocity), but also the homogeneity of the aquifer in this area.

As we get closer to the discharge area (west of the aquifer) the dashed curves (advective age) reflect progressively younger ages compared to the solid curves (advective-dispersive age). This illustrates the growing effect of dispersion on reducing ages along the flow path. Indeed, the difference stems from the fact that particle tracking does not incorporate all the dispersive and mixing effects.

In the lower part of the aquifer, ages represented by the solid lines (Goode's method) increase more rapidly than ages from the dashed lines. Using the approach of Goode (1996) enables the integration of the dispersive effect induced by the presence of the silty unit (to the east), which generates older ages at the base of the aquifer (Bethke and Johnson 2002).

Although the available number of measured ages is exceptional, it does not allow the calculation of a significant RMS error. However, a visual analysis shows that age results from the kriged model for the advective-dispersive simulation method have the best fit with isotopic ages (Figures 3.16d et 3.17c).

3.9 Discussion

3.9.1 Applicability of isotopic, advective and advective-dispersive ages

This study provides an illustration of the influence of some aquifer conditions on isotopic ages and the representativity of simulated groundwater ages using advective (particle tracking) and advective-dispersive (age mass transport) methods, depending on aquifer conditions. Within an

aquifer, a groundwater sample will be made up of waters with various ages, age mixing being a well-documented process (Bethke 2002, Weissman 2002). There is thus a certain ambiguity on the actual age and its isotopic estimation, first due to the dispersive mixing effect of heterogeneity, but also due to the sampling interval whose long or discrete nature will favor more or less mixing (Weissmann, 2002). Without complementary information, isotopic ages may thus lead to a false conclusions on an aquifer system (Waugh et al. 2003, Bethke and Johnson 2008, Cornaton 2011, McCallum 2013). There is thus an uncertainty related to isotopic ages that may be amplified by variations of the input signal (atmospheric concentrations) of some isotopic tracers (McCallum, 2013).

In order to use groundwater age as an indicator of dispersion, or to use it to calibrate hydrogeological numerical models (Solomon and Cook, 1994; Sanford, 2011), it is important to distinguish between various types of “model age”. Kinematic (or advective) ages obtained from methods such as particle tracking do not adequately represent mechanical dispersion. Advective ages thus cannot be compared to measured isotopic ages as the latter include important effects of dispersion. However, advective ages produced in heterogeneous K field are subject to the large-scale dispersive effect of varying flow directions and velocities induced by K heterogeneity. For aquifers devoid of low K lenses inducing a bias in isotopic ages, such as the aquifer system studied in Valcartier, comparison of advective model ages to isotopic ages can be done since silt layer mixing effects are limited and dispersive effects are relatively weak (Bethke, 2002).

Results from this study (Figures 3.16 and 3.17) show that the upper part of the aquifer has quite similar advective (dashed lines) and advective-dispersive (solid lines) ages for the kriged heterogeneous model and the homogeneous model. This match shows the limited dispersion that has occurred in the upper part of the aquifer where ages are relatively young. This is easily understandable for the homogeneous model, which is intrinsically non-dispersive. However, with identical dispersivities, the effect of heterogeneity in the kriged heterogeneous model is not more important than for the homogeneous model in the upper parts of the north and south flow paths. Even though the kriged model incorporated smoothing due to the use of hydrofacies proportions on 5-m intervals and the interpolation of these proportions, the presence of a continuous high

permeability zone is inferred to contribute to limited dispersion for relatively young ages. The analysis of connectivity on the stochastic models has shown a continuous high K_h ($> 10^{-3}$ m/s) zone extending east-west, which is inferred to also be present in the kriged model. This high K zone leads to strongly dominant advective transport, thus leading to limited dispersivity, which is further enhanced by the V shape of the aquifer that leads to flow convergence. It can thus be stressed that the present study benefits from a relatively favorable flow context with limited dispersive effects. Bethke and Johnson (2008) have shown that a comparison of isotopic and model ages (with various simulation methods) is better for homogeneous aquifers.

For highly heterogeneous aquifers, or those containing a significant proportion of low- K lenses, the use of mean groundwater age (advective-dispersive age) is considered a more representative approach for the numerical simulation of groundwater age (Goode 1996, McCallum 2013). Such an approach allows the representation of mixing effects through the use of a mean age considering “age mass” weighted by its volume. Using mean age in the advection-dispersion equation allows the consideration of hydrodynamic dispersion.

In the lower part of the Valcartier deltaic aquifer, significant dispersion effects lead to advective-dispersive ages being systematically higher older than advective ages obtained from particle tracking. These older ages are related to the presence of the prodeltaic aquitard in the eastern part of the flow system across the groundwater divide. Recharge in that area infiltrates in large part vertically downward through the semi-confining aquitard, after a mean residence time of about 11 years in the aquitard based on tritium-helium isotopic data (Murphy et al. 2011). Groundwater originating from flow through the aquitard thus has an older age which subsequently flows into and it flows at the deltaic aquifer base, which leads to dispersive mixing of these older waters with the overlying younger waters that have not transited through the aquitard (Bethke 2002). Such a dispersive mixing effect cannot be considered by particle tracking advective ages. Thus, in the lower part of the deltaic aquifer isotopic ages are better correlated with advective-dispersive ages, which are more representative. Advances towards the most down-gradient part (west) of the deltaic aquifer, the difference between advective (tracking) and advective-

dispersive ages increases, thus revealing the cumulative effect of dispersion on groundwater age (Reilly et al. 1994).

3.9.2 Impacts of K heterogeneity on dispersion

In this study, the use of the same conceptual and numerical models as well as the same boundary conditions provides a means to compare the impact of different spatial distributions of K on mass and age transport, without other interfering effects. In Figures 3.16 and 3.17, simulated ages using the kriged heterogeneous K distribution (red curves) appear more representative of measured isotopic ages than those obtained from the homogeneous model (blue curves). This could be an argument in favor of more heterogeneous models, thus of the use of stochastic heterogeneity models. The stochastic models developed in the present study integrate different scales of heterogeneity: at the scale of hydrofacies as well as the variability of K distributions within hydrofacies themselves. Stochastic models thus better preserve the variability of both hydrofacies and K , whereas the kriged model involves smoothing effects. Stochastic models should thus be intrinsically more dispersive than the kriged heterogeneity model.

A heterogeneous spatial distribution of K , with a representative level of variability, could be envisioned as eventually leading to numerical models for which the dispersive character is embedded in the K distribution and thus dispersivity could be independent of scale and would not have to be specified by the modeler. Only the dispersivity at the scale of numerical grid elements would have to be specified in the numerical model. The use of "intrinsically dispersive" heterogeneous K fields would also be an advantage for the transient numerical simulation of contaminant transport, for stages at which dispersive effects have not yet reached an asymptotic value for α_L , or a zero value for α_T (Frind et al., 1987).

3.9.3 Groundwater age as a potential indicator of dispersion

The choice of numerical model calibration parameters is quite important. These parameters have to reflect the sensitivity of the aquifer system conditions. Besides hydraulic heads, many hydrogeological characterization studies now emphasize the use of geochemical data to constrain

numerical models (Murphy et al. 2011). As part of the present study, groundwater age was used as a geochemical tracer, as the conditions of the aquifer system being studied were well suited for the application of tritium-helium groundwater age dating (Murphy et al. 2011).

To compare numerical modeling results with isotopic ages, an advantage of the use of advective-dispersive (mass transport) for the modeling is the simplicity of such an approach: zero age is specified at the top of the water table and the production of age “mass” is related directly to aquifer porosity (Goode 1996). Porosity was used by Murphy et al. (2011) as a calibration parameter, which was constrained by independent data, as aquifer recharge had been estimated by an independent method and verified using well hydrographs (Lefebvre et al. 2011). The important advantage of advective-dispersive age modeling is that it is subjected to the same processes of advection and dispersion as contaminant mass transport, which allows the intercomparison of results obtained from both age and contaminant tracers.

The advective modeling of groundwater age using particle tracking also provides a simple means to compare isotopic data with numerical modeling results (Murphy et al. 2011), under favorable aquifer conditions that were discussed previously. An interesting aspect of particle tracking is that it provides an indication of the dispersive effect of the heterogeneous K field at a large scale, without the specification of dispersivity in the numerical model. Comparison of the two methods of age modeling provides an indication of the more complete representation of age transport effects, as 1) it takes into account the mixing of waters of different ages due to the generation of relatively old water at the aquifer base that has transited through the upgradient aquitard, and 2) better represent the “cumulative” effects of dispersion on age in the downgradient part of the two flow paths used for particle tracking.

However, the validation of modeling results using age data remains difficult, as the error bars on both the model and data are significant. In the present study, the combined use of the TCE plume provided more constraints on the choice of the numerical model dispersivity values. The thickness of the plume was especially key in constraining transverse vertical dispersivity values.

3.9.4 Conceptual, numerical and stochastic models

Numerical hydrogeological modeling involves interdependent choices based on field observations and the complementary expertise of diverse specialists with the aim of providing a better understanding of a groundwater flow system in the perspective of a predefined set of questions that can be of a fundamental or applied nature. The following steps involved in numerical modeling are especially important:

- The choice of conceptual model (including geological and boundary conditions);
- The choice of the method used to define the heterogeneous spatial distribution of K ;
- The choice of the numerical simulator;
- The choice of calibration parameters.

It is not possible for models of the spatial distribution of K to exactly represent reality (Oreskes and Belitz, 2001). The representativity of such models depends above all on the expertise of the specialists building them (geologists, hydrogeologists, geophysicists, geostatisticians...). Stochastic methods that can be used to develop K heterogeneity models allow estimating the uncertainty related to the choice of the conceptual model, contrary to deterministic methods that are known to involve uncertainties but of an unknown magnitude (Renard, 2007). Quantifying uncertainty is particularly important when numerical models for which K heterogeneity is defined are developed for risk analysis. Kahneman and Tversky (1992) have shown that the perception of risk is erroneous when random probabilities, known or unknown, are considered to support decisions, with a tendency to overestimate low probability events (Bronner, 2013).

It is also necessary to adapt a conceptual model as more data and understanding become available on an aquifer system. Stochastic models are well-suited for such a purpose as they can be rapidly updated with new data, and can thus evolve from the initial development of a conceptual model to a stage of in-depth understanding of a system. Such updating does not require a change in the strategy of stochastic mapping of K heterogeneity and does not require rebuilding the entire model by hand.

However, this study has shown that a more complex and detailed level of heterogeneity requires the use of an adapted numerical grid, which needs to be much finer to handle high small-scale spatial variation of K values. This shows that heterogeneity modeling and numerical flow modeling are interrelated activities. Even though stochastic modeling of heterogeneity allows the quantification of uncertainty, it does not require a change of conceptual model. The conceptual model is at the base of a numerical model and represents a large part of the uncertainty related to a numerical model (Bredehoeft, 2005). In the perspective of stochastic modeling of heterogeneity, it would thus be better to also consider alternate sets of conceptual models to fully quantify the numerical model uncertainty. In the present study, the conceptual model was represented by the training image (TI) of stochastic modeling. In order to test if the TI is representative, a heterogeneous model using the TI and the mean values of K_h for each hydrofacies was used to simulate groundwater flow (Figure 3.8; TI + average K values). The RMS error of that model was higher than those of other models, including those using stochastic K heterogeneity, which shows that the choice of TI may not have been optimal. Even though the use of kriged proportions of hydrofacies seemed a sound basis to generate a TI, another approach may have provided a better TI. A simple hydrostratigraphic model representing only sand versus silt, such as what was used for the homogeneous model, could have perhaps provided a more adequate choice of TI for the stochastic simulations in order to better represent the continuity of hydrofacies in the deltaic depositional system of this aquifer.

3.10 Conclusions

This study investigated the impact of different models of hydraulic conductivity (K) heterogeneity on the numerical modeling of groundwater flow, conservative mass transport (TCE) and the transport of groundwater age. Numerical models were run using a homogeneous K model and two heterogeneous K models, one using the kriged distribution of hydrofacies and one using a realization of stochastic modeling of K . Results have first shown that groundwater flow patterns were generally satisfactorily reproduced for the three representations of the spatial

distribution of K . This shows that 1) the large scale heterogeneity was reproduced by the three models, but 2) that flow patterns did not represent an effective way to discriminate between models.

The impact of different spatial distributions of K were thus tested using two types of transport simulations: 1) mass transport to represent the TCE plume, and 2) groundwater age simulations using two methods, particle tracking and mass age transport using the method of Goode (1996). Age results using the approach of Goode (1996) were only obtained for the homogeneous model and for the heterogeneous model produced by the kriging of hydrofacies. Stochastic K models could not be used for mass transport simulations as they induced numerical errors for the level of discretization of the numerical model used. Numerical modeling of groundwater age supports its potential use as an indicator of hydrodynamic dispersion. Comparing the three models, particle tracking age simulations show the perturbations of the flow patterns, thus qualitatively showing the dispersive effect of heterogeneous K fields. Advective-dispersive age simulations allow the adjustment of dispersivity parameters α_L and α_T of each model, thus allowing the quantitative estimation of the dispersive effect of heterogeneous K fields.

The use of groundwater age provides a potential means to decompose local dispersive effects using observation wells spatially distributed throughout the entire aquifer. Groundwater age also allows the estimation of the nature of dispersive effects by the use of different methods of simulation, namely advective particle tracking simulations and advective-dispersive age mass transport simulations. The comparison of results obtained using these two methods show important dispersive mixing effects caused especially those caused by the presence of aquitards.

The Valcartier study site has favorable conditions for the simulation of groundwater age. Besides the conditions discussed in the paper, the detailed characterization of this aquifer supported the numerical modeling of groundwater age (e.g. validation of the TCE plume shape, recharge, porosity, flow and migration paths based on geochemical tracers). This study shows that groundwater age simulation has an important potential to provide a better understanding of aquifer systems, if it is supported by the analysis of conventional data.

4 SYNTHÈSE ET CONCLUSIONS GÉNÉRALES

4.1 Synthèse des résultats

Le chapitre 1 a permis de comparer deux méthodes de simulation d'âge (par advection et par advection-dispersion) pour différents modèles d'aquifères synthétiques en 2D, homogène ou hétérogènes. Les âges obtenus, le long de la limite de sortie des écoulements, ont mis en évidence des différences marquées entre les deux méthodes, principalement au niveau des valeurs maximales, mais également, de façon moins marquée, sur tout le long du profil : les âges advectifs ayant des valeurs supérieures. Deux conclusions sur les effets dispersifs ont pu être tirées :

- le modèle advectif surestime les âges à la limite, et
- la dispersion lisse les âges obtenus en réduisant les maximums.

La modélisation d'âges advectifs-dispersifs, sur plusieurs aquifères, a également permis de simuler l'effet de la structure de l'aquifère sur les âges. Les âges maximums ne sont pas obtenus dans le système homogène ni dans celui présentant une hétérogénéité silteuse (où les vitesses sont plus faibles), mais bien dans celui avec l'hétérogénéité de gravier. Ceci conforte le fait que l'obtention « d'âges maximum est hautement dépendant de la structure de l'aquifère et de la configuration des conditions aux frontières » (Goode, 1996).

Dans le chapitre 2, l'impact de différents modèles d'hétérogénéité a pu être testé sur les écoulements, le transport de masse de TCE et le transport de masse d'âge. Dans un premier temps, les résultats ont montré une restitution des patrons d'écoulement satisfaisante pour les trois types de modèles montrant ainsi 1) que l'hétérogénéité à grande échelle était respectée mais 2) que l'analyse des écoulements ne permettait pas une discrimination efficace des modèles.

L'impact des différents modèles a donc par la suite été testé sur deux types de transport : 1) la simulation du transport d'un panache de TCE; et 2) la simulation d'âge en utilisant deux

méthodes, le traçage de particules et la méthode de Goode (1996). L'impact des champs de K pour les trois modèles a été étudié avec le traçage de particule. La modélisation selon l'approche de Goode (1996) a été réalisée pour les modèles krigé et homogène seulement – les modèles stochastiques induisant des erreurs numériques. Concernant les modèles d'hétérogénéité, le modèle krigé a fourni les résultats les plus représentatifs pour la modélisation d'âge et le transport de TCE.

Les résultats valident l'utilisation de l'âge comme un indicateur de la dispersion hydrodynamique. En effet, les coupes d'âges advectifs mettent en évidence les bouleversements des patrons d'écoulement, permettant ainsi de relever qualitativement un effet dispersif du champ de K .

La modélisation d'âges advectifs-dispersifs a rendu possible l'ajustement des paramètres de dispersivité α_L et α_T de chaque modèle permettant cette fois de quantifier l'effet dispersif en s'ajustant sur les mesures.

L'utilisation de l'âge a également donné la possibilité de décomposer les effets dispersifs localement – par l'étude de puits d'observation répartis dans tout l'aquifère – mais également la nature de ces effets dispersifs par l'utilisation de méthodes de simulation différentes. Effectivement, la comparaison de deux méthodes de simulation d'âges a mis en lumière les effets dispersifs de mélange causés par l'hétérogénéité du champ de K , et particulièrement la présence d'aquitards.

Le site de Valcartier présentait des critères favorables à la modélisation d'âges. Mais en dehors des critères exposés précédemment, la connaissance importante du système aquifère (e.g. validation antérieure de la forme du panache de TCE, de la recharge, de la porosité, du système d'écoulement avec l'aide de la géochimie) a permis d'appuyer et de valoriser la modélisation d'âge.

Ainsi, la modélisation d'âge est incontestablement un atout pour la compréhension d'un système d'écoulement, à condition qu'elle puisse être soutenue par l'analyse de données plus classiques.

4.2 Applicabilité de l'utilisation de l'âge isotopique, modélisé par advection, modélisé par advection-dispersion

Cette étude a permis d'illustrer l'influence d'un système aquifère sur les âges isotopiques ainsi que la représentativité des âges simulés selon deux méthodes (traçage de particules et transport de masse). Au sein de l'aquifère, un échantillon d'eau sera le reflet de mélanges d'eaux plus ou moins jeunes : phénomène bien connu de mélange (Bethke 2002, Weissman 2002). Ainsi, l'âge de l'échantillon ou âge isotopique, est soumis à une certaine ambiguïté causée par l'hétérogénéité de l'aquifère mais aussi, potentiellement, par l'intervalle d'échantillonnage (Weissmann, 2002). Sans connaissances complémentaires, l'analyse de ces âges peut mener à une mésinterprétation du système aquifère (Waugh et al. 2003; Bethke et Johnson 2008; Cornaton 2011; McCallum 2013). Il existe donc une première incertitude reliée aux âges isotopiques qui peut être accrue par des variations du signal d'entrée (variations de concentrations atmosphériques) de certains traceurs utilisés (McCallum, 2013).

Afin d'utiliser l'âge comme un outil de mesure de la dispersion, ou de calage des modèles (Solomon et Cook, 1994; Sanford, 2011), il est important de comprendre les différentes définitions de l'âge modélisé. En effet, la définition des âges cinématiques (ou advectifs) n'intègre pas la dispersion mécanique. Les âges advectifs ne peuvent donc pas être comparés aux âges isotopiques qui sont soumis aux effets de la dispersion. Toutefois, les âges advectifs intègrent l'hétérogénéité du champ de K . En cela, ils sont porteurs d'un effet dispersif de grande échelle. Dans le cas d'aquifères ayant une faible proportion d'aquitards, comme à Valcartier, la comparaison des âges advectifs aux mesures isotopiques reste possible puisque les effets dispersifs seront faibles (Bethke, 2002 ; Murphy et al., 2011).

Dans la partie supérieure de l'aquifère deltaïque, les figures 3.16 et 3.17 montrent un faible écart entre les âges advectifs (courbes en pointillés) et advectifs-dispersifs (courbes pleines), pour les modèles krigé et homogène. Cette correspondance des âges laisse présager du faible caractère dispersif de ces modèles. Cela semble relativement intuitif pour le modèle homogène. Avec des valeurs de dispersivité identiques, l'impact de l'hétérogénéité du modèle krigé est finalement

proche de celui du modèle homogène, au moins le long des voies d'écoulement nord et sud. Même si le lissage induit par l'utilisation du krigeage et le calcul sur des intervalles de 5 m diminuent le niveau d'hétérogénéité du modèle krigé, la présence d'une zone connectée de forte conductivité hydraulique est une des raisons principales d'une faible dispersion. En effet, l'analyse de connectivité des modèles stochastiques indique une connexion est-ouest de la partie sud du système deltaïque (avec $K_h > 10^{-3}$ m/s) montrant ainsi le caractère advectif dominant de l'écoulement. On notera que la structure de l'aquifère – géométrie en V – favorise également la convergence des écoulements. Dans cette étude, nous pouvons souligner que le contexte d'écoulement est donc plutôt favorable à l'utilisation et à l'interprétation de l'âge (mesuré et modélisé) puisque les effets dispersifs seraient limités. En effet, Bethke et Johnson (2002) ont montré que la comparaison des âges isotopiques avec des âges modélisés (quelque soit la méthode) donne de meilleurs résultats pour des aquifères homogènes.

Dans le cas d'aquifères hétérogènes, ou ayant un volume d'aquitard plus important, l'utilisation de l'âge moyen (ou advectif-dispersif) est considérée comme l'approche la plus réaliste pour simuler l'âge de l'eau souterraine (Goode 1996, McCallum 2013). En effet, cette méthode permet d'intégrer les effets du mélange en passant par la définition d'un âge moyen, où l'âge de chaque « masse d'âge » est pondéré par son volume. L'utilisation de l'âge moyen dans l'équation d'advection-dispersion, permet ensuite de tenir compte de la dispersion hydrodynamique.

Dans la partie inférieure de l'aquifère de Valcartier, où les âges advectifs-dispersifs sont systématiquement plus élevés que les âges advectifs, l'effet dispersif est notable. Les âges plus élevés sont attribuables à la présence de silts prodeltaïques, dans la partie est de l'aquifère deltaïque, qui génèrent de l'eau plus vieille (Bethke, 2002). Cet effet dispersif ne peut être pris en compte par la simulation d'âge par traçage de particules (âges advectifs). Ainsi, dans la partie inférieure de l'aquifère, les âges isotopiques sont mieux corrélés aux âges advectifs-dispersifs qui sont plus représentatifs. On observe également qu'en s'approchant de l'exutoire, l'écart entre les courbes d'âges advectifs et advectifs-dispersifs augmente, révélant ainsi l'effet cumulatif de la dispersion (Reilly et al., 1994).

4.3 Impacts de l'hétérogénéité de K sur la dispersion

Dans cette étude, nous avons choisi d'utiliser un même modèle conceptuel et des conditions de calage identiques afin de se concentrer sur l'impact que pourrait avoir différentes distributions spatiales du champ de K . Sur les Figures 3.16 et 3.17, les âges modélisés avec le modèle krigé (courbes rouges) semblent être plus représentatifs que ceux du modèle homogène (courbes bleues). Cela pourrait être un argument en faveur de la complexification de l'hétérogénéité, qu'il serait nécessaire de tester avec les modèles stochastiques. L'utilisation de modèles stochastiques pourrait permettre d'intégrer différentes échelles d'hétérogénéité en fournissant un champ de K intrinsèquement dispersif. Ainsi, une plus grande flexibilité, du point de vue du dimensionnement du problème, pourrait être laissée au modélisateur, puisque la dispersion deviendrait alors indépendante de l'échelle d'observation. Seule la dispersivité à l'échelle microscopique, inférieure à la taille de l'élément, resterait encore à définir. L'utilisation de champs intrinsèquement dispersifs serait également un atout dans la modélisation du comportement de contaminants en régime transitoire : stade où les effets dispersifs n'ont pas encore atteint de valeur asymptotique pour α_L , ou nulle pour α_T (Frind, 1987).

4.4 L'âge, un indicateur potentiel de la dispersion

En modélisation, le choix des paramètres de calage revêt une importance particulière. En effet, il est nécessaire que ces paramètres reflètent la même sensibilité que celle du milieu. La plupart des études de caractérisation hydrogéologique font une forte utilisation d'analyses géochimiques (Murphy et al. 2011). Dans cette étude, nous avons montré que l'âge pouvait être utilisé, à la manière de tout autre traceur géochimique environnemental, dans le cas où des mesures isotopiques sont possibles (Murphy et al. 2011).

Un avantage de l'utilisation de l'âge advectif-dispersif est la simplicité de la modélisation du phénomène : un âge égal à zéro est fixé sur toute la surface de la nappe et le « vieillissement des masses d'âge » est directement relié à la porosité (Goode, 1996). La porosité a été utilisée par

Murphy et al. (2011) comme paramètre de calage, contraint par des données indépendantes. La recharge a également été estimée par l'analyse d'un ensemble de données indépendantes dont plusieurs hydrogrammes. Un avantage important de la modélisation d'âge réside dans le fait qu'il soit soumis aux mêmes processus d'advection et de dispersion que le transport, permettant la comparaison des résultats de modélisation d'âge et de traceurs.

Selon certaines conditions favorables exposées précédemment, la modélisation d'âge advectif par traçage de particule fournit aussi une méthode simple de comparaison des données isotopiques et de modélisation (Murphy et al., 2011). Un aspect intéressant du traçage de particule est qu'il permet d'illustrer un effet dispersif de K à grande échelle, sans spécification de la dispersivité dans les modèles. La comparaison de deux méthodes de modélisation d'âge a également mis en lumière l'effet intégrateur du transport d'âge advectif-dispersif qui a permis 1) de prendre en compte l'effet des aquitards en amont des puits d'observation et 2) de pouvoir décomposer les effets cumulatifs de la dispersion le long de deux lignes d'écoulement.

Cependant, la validation des résultats des modèles avec les données d'âges observés reste difficile, tant la marge d'erreur sur les mesures et les modèles peut être importante. Dans cette étude, la modélisation conjointe d'un panache de TCE a permis d'augmenter la précision du choix des paramètres de dispersivité. Ainsi, l'observation en coupe de l'épaisseur du panache modélisé a permis de faciliter l'ajustement de la dispersivité transversale.

4.5 Modèle conceptuel, modèle numérique et modèles stochastiques

La modélisation hydrogéologique est un ensemble de choix interdépendants, intégrant les observations de terrain et l'expertise de différentes spécialités, avec pour objectif de répondre à une problématique posée préalablement. Certaines étapes en modélisation sont particulièrement importantes :

- le choix du modèle conceptuel (géologie et conditions limites);

- le choix de la méthode de distribution spatiale de l'hétérogénéité;
- le choix du simulateur numérique;
- le choix des paramètres de calage.

Les modèles numériques d'hétérogénéité ne peuvent être considérés comme exacts car la confrontation avec la réalité du milieu est impossible (Oreskes et Belitz, 2001). Ils dépendent avant tout de l'expertise du géologue/hydrogéologue. Les méthodes stochastiques proposent de modéliser l'incertitude associée au choix du modèle conceptuel, en évitant une réponse déterministe, dont on sait qu'elle comporte des incertitudes, mais non quantifiées (Renard, 2007). Quantifier l'incertitude s'avère d'autant plus important quand les modèles sont construits dans une perspective d'analyse du risque. Kahneman et Tversky (1992) ont montré que la perception du risque est fallacieuse quand il s'agit d'intégrer des probabilités aléatoires connues ou inconnues à ses raisonnements, avec une tendance à la surestimation des faibles probabilités (Bronner, 2013).

Il faut également être capable de modifier le modèle conceptuel selon l'augmentation du niveau de compréhension et de connaissance du milieu modélisé. A cette fin, les modèles stochastiques possèdent des atouts de simplicité et de rapidité permettant l'addition de nouvelles données au premier stade de construction du modèle conceptuel, sans obligation de changer de stratégie de distribution de l'hétérogénéité.

Cependant, cette étude a montré que pour complexifier le niveau d'hétérogénéité, il est nécessaire d'adapter le degré de raffinement du modèle numérique : cela reflète l'interdépendance des choix de modélisation. Si la modélisation stochastique est un premier pas vers la quantification de l'incertitude, le choix du modèle conceptuel n'est pas souvent remis en question. Le modèle conceptuel se trouve pourtant à la base d'une analyse sur un modèle (Bredehoeft, 2005) et induit donc une grande part d'incertitude. Si l'on suit les préceptes de la modélisation stochastique, il serait donc plus juste de pouvoir utiliser un ensemble de modèles conceptuels. Dans cette étude, le modèle conceptuel est représenté par l'image d'entraînement (TI). Afin de tester sa représentativité, un modèle d'hétérogénéité utilisant l'image

d'entraînement et les valeurs moyennes de K_h de chaque HF a été utilisé pour la simulation des écoulements (figure 3.8 : TI+valeurs moyennes). L'erreur RMS observée – supérieure à celles des autres modèles – tend à montrer que ce choix d'image d'entraînement n'est peut-être pas optimal. Bien que l'utilisation des proportions d'HF's krigées permette d'intégrer une certaine information géologique et hydrogéologie au modèle conceptuel, les auteurs s'interrogent sur la représentativité de cette image d'entraînement dans le cadre de ce milieu deltaïque. L'utilisation du modèle hydrostratigraphique pourrait ici constituer un choix plus en lien avec la continuité du milieu.

5 RÉFÉRENCES

- Anderson, M.P., and W.W. Woessner. 1992. Applied Groundwater Modeling. *Academic Press, San Diego*.
- Adams, E.E., and L.W. Gelhar. 1992. Field study of dispersion in a heterogeneous aquifer. 2: Spatial moments analysis. *Water Resources Research* 28(12), 3293-3307.
- Barry, D.A., J. Coves, and G. Sposito. 1988. On the Dagan model of solute transport in groundwater: Application to the Borden site. *Water Resources Research* 24(10), 1805-1817.
- Barry, D.A. 1993. Time dependence of solute dispersion in aquifers. *Geotechnical Management of Waste and Contamination* 22-23.
- Bethke C.M., and T.M. Johnson. 2002. Paradox of groundwater age. *Geology* 30(2), 107–110
- Bethke C.M., and T.M. Johnson. 2008. Groundwater age and groundwater age dating. *Annual Review of Earth and Planetary Science* 36, 121–152.
- Blouin, M., R. Martel and E. Gloaguen. 2012. Accounting for aquifer heterogeneity: from geological data to management tools. *Ground Water* 51(3), 421–431.
- Boutin, A., R. Lefebvre, V. Blais, R. Martel, R. Therrien, M. Parent. 2004. Modelling of groundwater flow and TCE transport in the Valcartier area aquifer system. In: Demers, D., Leahy, D., Lefebvre, R., Leroueil, S., Martel, R. (Eds.), Proceedings of the 57th Canadian Geotechnical Conference and 5th Joint CGS/IAH Conference, October 24–27, 2004, Quebec City, Canada, Session 4B, pp. 36–43, ISBN 0-920505-29-5.
- Bredehoeft, J. 2005. The conceptualization model problem – surprise. *Hydrogeology Journal* 13, 37–46.
- Bronner, G. 2013. La démocratie des crédules, Paris, PUF, 2013.

- Caers, J. 2002. Multiple-point geostatistics: a quantitative vehicle for integrating geologic analogs into multiple reservoir models.
- Carle, S.F., B.K. Esser, and J.E. Moran. 2006. High-resolution simulation of basin-scale nitrate transport considering aquifer system heterogeneity. *Geosphere* 2(4), 195-209.
- Chambers, R.L., J.M. Yarus, K.B. Hird. 2000. Petroleum geostatistics for nongeostatisticians. *The leading Edge*.
- Chesnaux, R., J.W. Molson, and R.P. Chapuis. 2005. An Analytical Solution for Ground Water Transit Time through Unconfined Aquifers. *Ground Water* 43(4), 511–517.
- Cornaton, F. and P. Perrochet. 2002. Direct mathematical method for the computation of groundwater age and transit time distributions in reservoirs, including dispersion processes. *Acta Universitatis Carolinae—Geologica* 46(2/3), 58–61.
- Cornaton, F. 2004. Deterministic models of groundwater age, life expectancy and transit time distributions in advective-dispersive systems. Ph.D. diss., Faculty of Sciences, University of Neuchâtel, Switzerland.
- Cornaton, F., and P. Perrochet. 2007. Reply to “Comment on groundwater age, life expectancy, and transit time distributions in advective-dispersive systems: 1. Generalized reservoir theory” by Timothy R. Ginn. *Advances in Water Resources* 30 (4), 1058–1059. <http://dx.doi.org/10.1016/j.advwatres.2006.09.006>.
- Dagan, G. 1989. Flow and Transport in Porous Formations. Heidelberg, Germany: Springer-Verlag.
- Deutsch, C.V., and A.G. Journel. 1992. *GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide*. New York.
- Domenico, P.A. and F.W. Schwartz. 1998. Physical and Chemical Hydrogeology 2nd ed. John Wiley and Sons: Westford.
- Doyen, P.M. 2007, Seismic Reservoir Characterization, An Earth Modelling Perspective. EAGE Education Tour Series.

- Ekwuzel, B., P. Schlosser, W.M. Smetthie, L.N. Plummer, E. Busenberg, R.L. Michel, R. Weppernig and M. Stute. 1994. Dating of shallow groundwater-Comparison of the transient tracers $^3\text{H}/^3\text{He}$, chlorofluorocarbons, and ^{85}Kr . *Water Resources Research* 30: 1693-1708.
- Engdahl, N. B, T.R. Ginn, and G.E. Fogg. 2013. Using groundwater age distributions to estimate the effective parameters of Fickian and non-Fickian models of solute transport. *Advances in Water Resources* 54, 11–21.
- Engesgaard, P., J.W. Molson. 1998. Direct simulation of groundwater age in the Rabis Creek aquifer, Denmark. *Ground Water* 36(4), 577-582.
- Fetter, C.W. 1999. Contaminant Hydrogeology, 2nd ed., Prentice Hall, New Jersey.
- Fleckenstein, J.H., R.G. Niswonger, and G.E. Fogg. 2006. River-aquifer interactions, geologic heterogeneity, and low-flow management. *Ground Water* 44 (6), 837–852.
- Freeze, R.A., and J.A. Cherry. 1979, Groundwater. Englewood Cliffs, NJ.:Prentice Hall, 604 pp.
- Frei, S., J.H. Fleckenstein, S.J. Kollet, and R.M. Maxwell. 2009. Patterns and dynamics of river-aquifer exchange with variably-saturated flow using a fully-coupled model. *Journal of Hydrology* 375(3-4), 383–393. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2009.06.038.
- Fried, J. J. 1975. Groundwater Pollution, Elsevier. Amsterdam. 330 pp.
- Frind, E.O., M. Sousa, J.P. Jones, and D.L. Rudolph. 2009. Well Vulnerability: A Model Comparison – Issues and Pitfalls. 2nd International FEFLOW User Conference. September 2009, Postdam/Berlin, Germany.
- Frind, E.O., Sudicky, E.A. and Schellenberg, S.L. 1987. Micro-scale modelling in the study of plume evolution in heterogeneous media, *Stochastic Hydrology and Hydraulics* (1), 263–279.
- Frind, E.O. 1988. Solution of the advection-dispersion equation with free-exit boundary. *Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations* 4(4), 301–314.

- Frind, E.O., Molson, J.W., 1989. On the relevance of the transport parameters in predictive modelling of groundwater contamination, Proceedings, International Symposium on Groundwater Management: Quantity and Quality, Benidorm, Spain.
- Gelhar, L.W., and C.L. Axness. 1983. Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resources Research* 19(1), 161–180.
- Gelhar, L.W. 1986. Stochastic subsurface hydrology from theory to applications. *Water Resources Research* 22(9), 135S-145S.
- Goode D. 1996. Direct simulation of groundwater age. *Water Resources Research* 32(2), 289–96.
- Goovaerts, P. 1997. *Geostatistics for Natural Resources Evaluation*. New York: Oxford University Press.
- Graham, W.D., D.B. McLaughlin. 1991. A stochastic model of solute transport in groundwater: Application to the Borden, Ontario, Tracer Test. *Water Resources Research* 27 (6), 1345–1359.
- Guardiano, F., and R.M. Srivastava. 1993. Multivariate geostatistics: beyond bivariate moments. Ed. A. Soares. *Geostatistics-Troia* 1, 133–144.
- Holzbecher, E., and S. Sorek. 2005. Numerical Models of Groundwater Flow and Transport, Part 13, *Encyclopedia of Hydrological Sciences*, John Wiley & Sons Ltd., Vol. 4, Art. 155, 2001-2144, 2005.
- Hu, L.Y., and T. Chugunova. 2008. Multiple-point geostatistics for modeling subsurface heterogeneity: A comprehensive review. *Water Resources Research* 44, 1–14. DOI: 10.1029/2008WR006993.
- Journel, A.G., and C.J. Huijbregts. 1978. *Mining Geostatistics*. New York: Academic Press.
- Kabala, Z.J. and Sposito, Garrison. 1991. Stochastic model of reactive solute transport with time-varying velocity in a heterogeneous aquifer, *Water Resources Research* 27(3), 341.

- Kahneman D., Tversky A. (1992), “Advances in Prospect Theory: Cumulative Representation of Uncertainty”, *Journal of Risk and Uncertainty* 5(4), 297-323.
- Koltermann, C.E., and S.M. Gorelick. 1996. Heterogeneity in sedimentary deposits: A review of structure-imitating, process-imitating and descriptive approaches. *Water Resources Research* 32(9), 2617–2658.
- Lefebvre, R., Boutin, A., Martel, R., Therrien, R., Parent, M., Blais, V., 2003. Caractérisation et modélisation numérique de l’écoulement et de la migration de la contamination en TCE dans l’eau souterraine du secteur Valcartier, Québec, Canada. INRS-Eau, Terre et Environnement, Institut national de la recherche scientifique, Research report INRS-ETE R-631, 99pp. (in French).
- Lefebvre, R., Boutin, A., Blais, V., Martel, R., Therrien, R., Parent, M., Ouellon, T., Roy, N., Lapointe, M., 2004. Characterization of the hydrogeological context and dissolved TCE plume in the granular aquifer system of the Valcartier area, Québec, Canada. In: Demers, D., Leahy, D., Lefebvre, R., Leroueil et, S., Martel, R. (Eds.), Proceedings of the 57th Canadian Geotechnical Conference and 5th Joint CGS/IAH Conference, October 24–27, Québec City, Canada, Session 4B, pp. 28–35, ISBN 0-920505-29-5.
- Lefebvre, R., Maltais, I., Paradis, D., Michaud, Y., 2011. Recharge assessment from daily soil moisture balance and well hydrographs, Portneuf unconfined aquifer, Canada. *Geohydro2011*, Joint IAH-CNC, CANQUA and AHQ conference, Quebec City, Canada, August 28-31, 2011, 8 p.
- Lefebvre, R., 2010. Expertise hydrogéologique sur le TCE dans l’eau souterraine à Shannon, Québec, Canada. INRS Research report R-1153, July 2010, 43 p. and 15 plates. (In French)
- Leray, S., J-R. de Dreuzy, O. Bour, T. Labasque, L. Aquilina. 2012. Contribution of age data to the characterization of complex aquifers. *Hydrogeology Journal* 464–465, 54–68.
- de Marsily, G., F. Delay, J. Gonçalvès, Ph Renard, V. Teles, and S. Violette. 2005. Dealing with spatial heterogeneity. *Hydrogeology Journal* 13(1), 161–183.

- Mariethoz, G., P. Renard, F. Cornaton, and O. Jaquet. 2009. Truncated plurigaussian simulations to characterize aquifer heterogeneity. *Ground Water* 47(1), 13–24. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2008.00489.x.
- McCallum, J.L., P.G. Cook, C.T. Simmons, and A.D. Werner. 2013. Bias of apparent tracer ages in heterogeneous environments. *Ground Water*. DOI: 10.1111/gwat.12052.
- Mc Lennan, J. and C.V. Deutsch. 2005. Selecting Geostatistical Realizations by Measures of Discounted Connected Bitumen, SPE Paper No. 98168-PP, SPE International Thermal Operations and Heavy Oil Symposium, Calgary, November 1-3.
- Molson, J.W., and E.O. Frind. 2010. FLONET/TR2 Two-Dimensional Simulator for Groundwater Flonets, Contaminant Transport and Residence Time. User Guide Version 3.0 October 2010.
- Molson, J.W., and E.O. Frind. 2005. How old is the water? Simulating groundwater age at the watershed scale. In *Proceedings of GQ2004, 4th International Groundwater Quality Conference “Bringing Groundwater Quality Research to the Watershed Scale”*, Waterloo, Canada: July 2004, IAHS Publication no. 297, ed. N.R. Thomson, 482–488. Wallingford, UK: International Association of Hydrological Sciences (IAHS) Press.
- Molson, J.W., Frind, E.O., 2009. Numerical simulations of groundwater age in fractured rock. Proc: 62nd Annual CGS and 10th Joint IAH-CNC Groundwater Specialty Conference, Halifax.
- Molson, J., Frind, E.O., 2011. Application of Groundwater Life Expectancy in the Delineation of Time-Dependent Capture Zones for Water Supply Wells, GQ10: Groundwater Quality Management in a Rapidly Changing World (Proc. 7th International Groundwater Quality Conference, Zurich, Switzerland). IAHS Publ, Zurich, Switzerland. 342.
- Moyen, R. and P. Doyen. 2009. Reservoir connectivity uncertainty from stochastic seismic inversion. *SEG Annual Meeting, Houston, Texas*.

- Murphy, S., T. Ouellon, J.-M. Ballard, R. Lefebvre, I. D. Clark. 2011. Tritium–helium groundwater age used to constrain a groundwater flow model in a TCE-contaminated valley fill aquifer. *Hydrogeology Journal* 19 (1), 195-207.
- Murphy, S., Ouellon, T., Lefebvre, R., Clark, I.D., Ballard, J.-M., Racine, C., 2010. Tritium-Helium dating and geochemical characterization of groundwater in the Valcartier deltaic aquifer system. INRS Research report R-960, February 2010, ISBN 978-2-89146-558-8, 103 p., 24 map plates and appendix on CD.
- Oreskes, N., and K. Belitz. 2001. Philosophical Issues in Model Assessment. In: Anderson, M.G., Bates, P.D. (Eds.), *Model Validation: Perspectives in Hydrological Science*. John Wiley and Sons Ltd., London, pp. 23–41
- Ouellon, T., R. Lefebvre, D. Marcotte, A. Boutin, V. Blais, and M. Parent. 2008. Hydraulic conductivity heterogeneity of a local deltaic aquifer system from the kriged 3D distribution of hydrofacies from borehole logs. *Valcartier, Canada. Journal of Hydrology* 351(1–2), 71–86.
- Ouellon, T., Lefebvre, R., Blais, V., Racine, C., Ballard, J.-M., 2010. Synthèse du contexte hydrogéologique et de la problématique du TCE dans le secteur Valcartier, Québec, Canada. INRS, Centre - Eau Terre Environnement, Research report R-961, July 2010, ISBN 978-2-89146-560-1, 119 p., 77 plates and electronic appendix on CD.
- Ouellon, T., Lefebvre, R., Murphy, S., Clark, I.D., Ballard, J.-M., Parent, M., 2012. Geological, hydraulic and geochemical constraints on a numerical flow model of a TCE-contaminated aquifer. Abstract #890, 39th IAH Congress, Niagara Falls, Canada, September 16-21, 2012, Invited presentation.
- Parent, M., F. Girard, N. Fagnan, Y. Michaud, E. Boisvert, and R. Fortier. 2003. Caractérisation géologique des formations superficielles enfouies. In *Guide Méthodologique Pour la Caractérisation Régionale des Aquifères Granulaires*, 140. ed. Y. Michaud, R. Lefebvre, and R. McCormack.

- Plummer, L.N., R.L. Michel, E.M. Thrumann, and P.D. Glynn. 1993. Environmental tracers for age dating young ground water. *Regional Ground-Water Quality*, ed. W.M. Alley, 255-294. New York : Van Nostrand Reinhold.
- Poreda, R. J., T.E. Cerling, D.K. Solomon. 1988. Tritium and helium isotopes as hydrologic tracers in a shallow unconfined aquifer. *Journal of Hydrology* 103, 1-9.
- Reilly, T., L. Plummer, P. Phillips, and E. Busenberg. 1994. Tritium and helium 3 isotope ratios for direct estimation of spatial variations in groundwater recharge. *Water Resources Research* 30(2), 421-433.
- Renard, P. 2007. Stochastic hydrogeology: What professionals really need? *Ground Water* 45(5), 531-541. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2007.00340.x.
- Renard, P., and D. Allard. 2013. Connectivity metrics for subsurface flow and transport. *Advances in Water Resources* 51, 168-196.
- Rubin, Y. and Hubbard, S. (eds.), 2005. Hydrogeophysics. Springer, New York.
- Ruggeri, P., Irving, J., Gloaguen, E., and Holliger, K. 2013. Regional-scale integration of multiresolution hydrological and geophysical data using a two-step Bayesian sequential simulation approach. *Geophysical Journal International* doi: 10.1093/gji/ggt067.
- Sanford, W. 2011. Calibration of models using groundwater age. *Hydrogeology Journal*, July, 1-4. doi:10.1007/s10040-010-0637-6.
- Schlosser, P., M. Stute, C. Sonntag, and K.O. Munnich. 1988. Tritogenic ^3He in Shallow Groundwater. *Earth and Planetary Science Letters*, v. 89, pp. 353-362.
- Schulze-Makuch, D. 2005. Longitudinal dispersivity data and implications for scaling behavior. *Ground Water* 43(3), 443-456.
- Solomon, D.K. and P.G. Cook. 1994. Groundwater age as an indicator of recharge to unconfined aquifers. AGU 1994 Spring Meeting, Baltimore, MD, 155 pp.

- Srivastava, R. 1994. An overview of stochastic methods for reservoir characterization. In: Chambers, R.L. (ed.) *Stochastic Modeling and Geostatistics: Principles, Methods, and Case Studies, Computer Applications* 3, 380.
- Strebelle, S., and A.G. Journel. 2000. Sequential simulation drawing structures from training images. *Stanford Center for Reservoir Forecasting Annual Report* 13, 1–12.
- Strebelle, S. 2002. Conditional simulation of complex geological structures using multiple-point statistics. *Geostatistics for Environmental Applications*, 1–21. the Netherlands: Springer.
- Sposito, G., D.A. Barry. 1987. On the Dagan model of solute transport in groundwater: Foundational aspects. *Water Resources Research* 23(10), 1867-1875.
- Sudicky, E. A. 1986. A natural gradient experiment of solute transport in a sand aquifer: spatial variability of hydraulic conductivity and its role in the dispersion process. *Water Resources Research* 22(13), 2069-2082.
- Szabo, Z., D.E. Rice, L.N. Plummer, E. Busenberg, S. Drenkard and P. Schlosser. 1996. Age dating of shallow groundwater with chlorofluorocarbons, tritium/helium 3, and flow path analysis, southern New Jersey coastal plain. *Water Resources Research* 32, 1023-1038.
- WASY Software, 2005. FEFLOW 6.1 finite element subsurface flow and transport simulation system: user's manual. WASY Institute, Berlin, 192 pp.
- Xu, M., and Y. Eckstein. 1995. Use of weighted least-squares method in evaluation of the relationship between dispersivity and field scale. *Ground Water* 33(6-10), 16-24.

