Université du Québec
Institut National de la Recherche Scientifique
Centre Eau Terre Environnement

PROPRIÉTÉS HYDRAULIQUES ET PROCESSUS D'INVASION PAR LA MER DE CHAMPLAIN DU SYSTÈME AQUIFÈRE ROCHEUX FRACTURÉ RÉGIONAL DE LA MONTÉRÉGIE EST, QUÉBEC, CANADA

Par

Marc LAURENCELLE

Thèse présentée pour l'obtention du grade de *Philosophiæ doctor*, Ph.D.
en sciences de la terre

Jury d'évaluation

Président du jury et examinateur interne	Daniel Paradis Commission géologique du Canada Ressources naturelles Canada
Examinateur externe	Olivier Bour Géosciences Rennes Université de Rennes 1
Examinateur externe	Kent Novakowski Département de génie civil Queen's University
Directeur de recherche	René Lefebvre INRS Centre Eau Terre Environnement
Codirecteurs de recherche	Michel Parent Commission géologique du Canada Ressources naturelles Canada
	John Molson Département de géologie et de génie géologique Université Laval

© droits réservés de *Marc Laurencelle*, 2018

Choisis toujours le chemin qui semble le meilleur même s'il paraît plus difficile :
l'habitude le rendra bientôt agréable.

– PYTHAGORE –

REMERCIEMENTS

Faire une thèse n'est pas une mince affaire, ne serait ce qu'à en juger par l'épaisseur du document final ou la durée du projet. De plus, bien que ce soit d'abord l'œuvre d'un individu (familièrement appelé doctorant), c'est aussi le fruit des efforts et soutiens de tout un chacun. C'est pourquoi je tiens à remercier personnellement tous ceux et celles qui ont contribué, de près ou de loin, au succès de ce projet de recherche.

En tout premier lieu, je remercie le Ministère du développement durable, de l'environnement et de la lutte contre les changements climatiques (MDDELCC) du Gouvernement du Québec, d'avoir soutenu ce projet dans le cadre de son programme Programme d'acquisition des connaissances sur les eaux souterraines (PACES). Merci également au Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada (CRSNG) d'avoir participé au financement de mes travaux en m'accordant bourse doctorale durant les trois premières années du projet.

Du côté de mon encadrement, je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de thèse. Merci à toi, René, d'avoir identifié avec moi ces problématiques de recherche passionnantes puis d'y avoir ensuite investi autant d'énergie et de temps. L'intérêt et la curiosité que tu as manifestés tout au long de ces travaux furent totalement contagieux. Et réciproquement, je crois bien, puisque les fruits de ma curiosité semblent t'avoir plu à chaque fois. Un grand merci, René, d'avoir cru en moi et de m'avoir donné autant de liberté (et de temps) pour mener ce projet ma façon, c'est-à-dire mu avant tout par curiosité. C'est grâce à cette latitude de ta part que notre démarche exploratoire s'est finalement avérée fructueuse et particulièrement satisfaisante.

Merci Michel, d'avoir partagé avec moi de tes connaissances « illimitées » sur l'histoire quaternaire du Québec et sur maints autres aspects « paléo » toujours fort intéressants. C'est d'ailleurs en grande partie à tes apports et collaborations scientifiques que l'on doit le volet « paléo » de ma thèse. Merci d'avoir toujours été disponible, intéressé et enclin à partager voire accroître tes connaissances en vue de répondre à mes interrogations avec rigueur et clarté.

Merci John, d'avoir accepté de m'aider dans mes travaux de modélisation numérique, par tes conseils, et même en adaptant certains de tes logiciels de simulation à mes besoins. J'ai appris beaucoup en suivant ton cours de « modélisation en hydrogéologie », en utilisant tes logiciels FLONET/TR2, HEATFLOW et SALTFLOW, et surtout, en discutant avec toi. Bref, c'est en partie grâce à toi que j'ai développé les compétences et la motivation requises pour résoudre des problèmes d'hydrogéologie par la modélisation numérique.

Ensuite, je tiens à remercier ensemble tous les membres du jury de validation de ma thèse, d'avoir pris le temps de lire attentivement le long document que je vous ai soumis. Merci pour vos commentaires, suggestions de révisions, vos idées et pour l'appréciation que vous avez montrée envers mes travaux.

À toute l'équipe du projet PACES de la Montérégie Est, et plus spécialement à ceux de l'INRS et de la CGC à Québec, merci. Merci pour le bon temps passé avec plusieurs d'entre vous sur le terrain en 2010. Merci pour votre écoute, votre soutien, vos bonnes idées, votre entraide, et enfin, pour les belles amitiés nées de ce projet d'autant plus enrichissant. Un merci tout spécial à Jean-Sébastien et à Pierre, mes complices hydrogéologues du quotidien, avec qui j'ai mangé et jasé tous les midis, partagé mes « pensées souterraines » du moment, posé et résolu tant de problèmes techniques de toutes sortes. Un merci spécial aussi à toi Christine, d'avoir codirigé mon doctorat tout au long du PACES. Merci pour ton soutien, tes révisions minutieuses et le temps que tu m'as accordé.

À mes collègues d'hier et d'aujourd'hui du 2402 ± 1, un grand merci. Pour votre agréable camaraderie ; d'avoir mis autant de soleil dans nos locaux sans fenêtres ; pour votre humour ; et d'avoir agrémenté ce long doctorat d'autant de bons moments.

Merci également à mes autres collègues de l'INRS, pour votre amitié, votre aide, et de vous être patiemment accommodés jusqu'à prendre goût (ou presque) à mes calembours particulièrement concentrés sur l'heure de midi. Un merci particulier à Pierre Masselot, pour nos innombrables discussions entre passionnés de R, de musique et de statistiques, pour ton amitié et pour ta complicité dans l'émission des « calembours du midi ».

Merci à mes amis proches de Québec : Pierre, Antoine, Julie, François, Julia, Clémence, Isabelle, William, d'avoir rehaussé mon quotidien de nombreuses activités fort plaisantes, du weekend au chalet au simple 5 à 7, du gros BBQ à l'après-midi tranquille jeux de société. Merci aussi de vous être intéressés à l'avancement de mon projet, et pour vos encouragements fréquents.

De même, merci à mes amis plus anciens pour votre soutien. Tout particulièrement à toi, Pierre-Olivier, mon vieux pote. Merci d'avoir appelé régulièrement, d'avoir suivi mon périple avec intérêt, et pour tes ondes positives.

À ma famille de même qu'à ma belle-famille, merci du fond du cœur. Merci de m'avoir soutenu tout au long de mon doctorat, de m'avoir écouté et réconforté lorsque la motivation vacillait, de l'intérêt avec lequel vous avez suivi mon aventure doctorale, et pour tous les messages affectueux que vous m'avez adressés. Un merci tout particulier à mon père, Louis, pour tout le temps que tu

m’as généreusement offert pour réviser mes textes et pour la rapidité et la qualité de tes réponses à mes nombreuses questions sur la forme et même le fond de mes travaux.

Enfin, un incommensurable merci à ma conjointe, Marion. Merci pour ton soutien constant (et patient) jusqu’au bout de mon (très) long périple doctoral. Merci en particulier de m’avoir si efficacement *coaché* au cours des derniers mois précédant le dépôt initial de ma thèse : je suis pratiquement certain que je n’aurais pas pu terminer à temps sans ton aide. En un mot, merci, du fond du cœur, d’être, et de partager ta vie avec moi. Tu m’apportes tant.

Je dédie cette thèse à René Lefebvre, directeur de recherche en qui j’ai découvert un puits d’inspiration sans fond. Quel emmagasinement !... et pourtant, quelles fortes production et transmissivité d’idées ! J’espère que notre collaboration fructueuse durera longtemps encore.

AVANT-PROPOS

Cette thèse par articles est composée de 8 chapitres accompagnés de plusieurs annexes. Les chapitres 1 à 5 présentent une synthèse de la démarche et des résultats obtenus à l'issue de ces travaux de doctorat. Les chapitres 6 à 8 présentent quant à eux les trois articles écrits au cours du doctorat. Ces trois articles sont, dans l'ordre :

Article 1 (Chapitre 6 : à soumettre à la revue *Hydrogeology Journal*) :

Laurencelle M & Lefebvre R. (À soumettre). Reliability of transmissivity estimates from specific capacity data.

Article 2 (Chapitre 7 : à soumettre à la revue *Water Resources Research*) :

Laurencelle M & Lefebvre R (À soumettre). Regional-scale hydraulic-conductivity vertical profiles derived from specific capacity tests in fractured rock aquifers freed from well-drillers' sampling bias.

Article 3 (Chapitre 8 : à traduire puis soumettre à la revue *Earth System Dynamics*) :

Laurencelle M, Lefebvre R, Parent M & Molson J. (À soumettre). Conditions paléo-hydrogéologiques et processus d'invasion par la Mer de Champlain d'un système aquifère rocheux régional au sud du Québec.

Les annexes de la thèse, quant à elles, sont toutes présentées à la fin du présent document, y compris celles dont le contenu est téléchargeable séparément.

Veuillez noter, en outre, que l'ensemble des programmes informatiques développés au cours de ces travaux doctoraux et fournis en annexe sont diffusés **sous licence**. Vous trouverez le texte de la licence dans les pages de présentation des annexes concernées, en fin du présent document (ex. Annexe A0.4).

RÉSUMÉ

Une compréhension de la dynamique d'écoulement des grands systèmes aquifères régionaux est requise pour supporter la gestion durable des ressources en eau souterraine, mais acquérir une telle compréhension présente de nombreux défis à la fois scientifiques et techniques. La pérennité des ressources en eau souterraine est menacée par les impacts potentiels des changements climatiques, particulièrement pour les aquifères côtiers où le changement relatif du niveau marin pourrait mener à l'invasion d'eau marine. L'étude des paléoconditions et de l'impact d'événements géologiques majeurs sur les aquifères peut nous éclairer sur les conditions environnementales susceptibles d'affecter les ressources régionales en eau souterraine. Afin de comprendre quantitativement la dynamique des systèmes aquifères et prédire l'impact de changements dans leurs conditions, il est nécessaire de disposer d'estimés de leurs propriétés hydrauliques d'écoulement et d'emmagasinement qui soient représentatifs à l'échelle régionale. Pour les systèmes aquifères rocheux sédimentaires, ces estimés doivent considérer plus particulièrement la réduction de la conductivité hydraulique avec la profondeur, une réduction qui est communément observée et qui contrôlerait la majeure partie de l'écoulement dans ces formations. Les travaux réalisés dans le cadre de cette thèse avaient pour but à la fois de développer des approches fournissant de meilleures estimations de la conductivité hydraulique (K) à l'échelle régionale et d'utiliser ces estimés pour étudier l'impact de changements importants des paléoconditions de surface sur la salinité de l'eau souterraine. La région de la Montérégie Est, dans le sud du Québec au Canada, offre un milieu opportun pour réaliser de telles études, d'abord parce qu'elle a fait récemment l'objet d'une évaluation détaillée de ses ressources en eau souterraine et de ses conditions hydrogéologiques. Et ensuite, parce que son système aquifère régional se distingue par la présence d'eaux saumâtres non potables couvrant plus de 2 000 km^2, et dont l'origine proviendrait de l'invasion de la Vallée du Saint-Laurent par les eaux salées de la Mer de Champlain, un bras de mer de l'océan Atlantique, il y a environ 13 000 ans. Ce contexte offre donc un cas de référence particulièrement intéressant pour illustrer la réponse à long terme d'un système aquifère soumis à la perturbation majeure que représente une invasion marine, et ainsi mieux comprendre l'impact que peuvent avoir les changements climatiques sur des systèmes aquifères régionaux.

Le premier volet de la thèse s'est intéressé à la caractérisation hydraulique des aquifères rocheux fracturés régionaux à partir de données d'essais de capacité spécifique. Les données de capacité spécifique (SC : de l'anglais "specific capacity"), effectués de façon routinière par les entreprises

de forages pour évaluer la capacité de production en eau des puits domestiques, sont fréquemment utilisées pour estimer la transmissivité (T) et la conductivité hydraulique (K). Dans la mesure où les données de SC sont beaucoup plus nombreuses et plus aisément accessibles que les données d'essais de pompage standards, elles peuvent effectivement apporter une image plus complète de la variabilité spatiale de T à l'intérieur de l'aquifère, en particulier dans les études portant sur les aquifères régionaux. L'approche conventionnellement utilisée pour estimer T à partir de données de SC est basée sur la solution de Theis, mais très peu de travaux ont évalué quantitativement la fiabilité de telles estimations de T(SC). L'objectif principal des travaux du chapitre 6 était ainsi d'évaluer la fiabilité et la précision des estimations de T dérivées de données de SC à l'aide de méthodes analytiques. Pour cela, deux méthodes analytiques d'estimation de T(SC) ont été considérées et comparées, à savoir la méthode conventionnelle (basée sur la solution de Theis) et une nouvelle méthode d'estimation de T(SC) basée plutôt sur la solution de Papadopulos-Cooper, qui tient compte de l'emmagasinement de l'eau dans le tubage du puits. Les résultats du chapitre 6 de la thèse révèlent que la fiabilité des estimations de T(SC) est en réalité limitée et grandement variable. Une application de la nouvelle approche d'estimation de T(SC) proposée au jeu de données de SC de la Montérégie Est (18 313 essais de SC rapportés) démontre l'importance de tenir compte de la fiabilité et de la précision limitée des estimations de T(SC) lors de l'exploitation de jeux de données de SC, et dévoile ainsi la nature potentiellement trompeuse des résultats obtenus à l'aide de l'approche conventionnelle.

Les estimations de T(SC) sont ensuite couramment utilisées pour déduire des profils verticaux de la conductivité hydraulique équivalente (K_b) d'aquifères rocheux fracturés qui, en général, tendent à être davantage fracturés et perméables à de faibles profondeurs. L'objectif clé des travaux du chapitre 7, poursuivant ceux du chapitre précédent, était donc de développer une méthode permettant d'exploiter les estimations de T(SC) afin de déduire des profils des propriétés de fracturation et de K_b représentatifs à l'échelle régionale, en tenant compte à la fois du biais d'échantillonnage lié aux pratiques courantes des puisatiers et de la fiabilité limitée des estimations de T(SC). Pour ce faire, une approche par simulation Monte Carlo a été développée. Le modèle stochastique conçu comprend deux sous-modèles : un premier simulant des milieux fracturés 1D verticaux hétérogènes, et un second qui vient y forer des puits à des profondeurs non aléatoires reproduisant ainsi le biais d'échantillonnage par les puisatiers. Des variables aléatoires sont utilisées pour paramétrer ces sous-modèles afin de simuler la variabilité ou l'incertitude des différentes composantes du problème. Une exécution itérative du modèle stochastique permet d'obtenir de multiples réalisations de colonnes d'aquifère rocheux fracturé hétérogène, et d'ensuite simuler le biais d'échantillonnage (des milieux fracturés) en reconstituant

le processus de prise de décisions des puisatiers quant à la profondeur à laquelle arrêter le forage, notamment en fonction de la T du trou foré, pour chacune des colonnes simulées. Cette approche a été appliquée au système aquifère rocheux fracturé de la Montérégie Est, après division en trois contextes hydrogéologiques distincts. Le modèle stochastique a été calé manuellement pour chacun des contextes hydrogéologiques afin de reproduire les distributions de T et de profondeur des puits de la région, d'une part, et d'ensuite déduire les profils verticaux de K_b et leur incertitude associée, d'autre part. Les résultats montrent que la tendance à la décroissance de T avec la profondeur, communément obtenue lors de l'exploitation de données de SC afin de caractériser des aquifères rocheux fracturés régionaux, est un résultat trompeur découlant du biais d'échantillonnage par les puisatiers. De plus, l'hétérogénéité des ouvertures des fractures, et donc des transmissivités des fractures, a un impact nettement plus important sur les profondeurs de puits biaisées simulées que les diminutions, avec la profondeur, de l'ouverture moyenne des fractures ou de la densité moyenne de fractures. La profondeur des puits forés par les puisatiers serait donc, à l'échelle régionale, contrôlée non seulement par le contexte hydrogéologique (piézométrie, épaisseur des dépôts meubles, ...) mais aussi et surtout par la K_b très hétérogène du réseau de fractures, laquelle peut être caractérisée par l'approche stochastique proposée dans cette thèse.

Le second volet de la thèse s'est intéressé à l'étude paléo-hydrogéologique du système aquifère régional de la Montérégie Est, du début de l'épisode d'incursion marine par la Mer de Champlain jusqu'à aujourd'hui. L'objectif central des travaux documentés dans le chapitre 8 était ainsi de mieux comprendre les processus en jeu dans l'invasion d'eau marine des systèmes aquifères sous les paléoconditions ayant prévalu dans le sud du Québec. Les travaux ont été fondés sur un modèle conceptuel qui considère l'évolution temporelle des paléoconditions marines (niveau d'eau et salinité), la mise en place d'un aquitard argileux sur le fond marin et la diminution de la conductivité hydraulique de l'aquifère rocheux avec la profondeur. Les processus régissant le transport de la salinité ont été investigués à partir de modèles considérant des conditions allant de très simples à plus complexes et réalistes. Certains des modèles numériques ont été préparés puis simulés dans l'environnement de programmation R, et d'autres avec le logiciel FEFLOW. Les paléoconditions et processus en jeu ont d'abord été étudiés à l'aide de modèles numériques en une dimension (colonnes 1D verticales) et ensuite été simulés de façon combinée sur une coupe 2D verticale représentant schématiquement la région d'étude. Les résultats démontrent l'impact majeur de la sédimentation d'un aquitard argileux sur le fond marin, non seulement pendant mais

aussi après l'épisode marin. L'aquitard en formation a tôt fait de freiner l'invasion marine directe de l'aquifère rocheux sous-jacent. Une partie de la salinité emmagasinée dans le grand volume d'eau piégée dans l'aquitard continue toutefois à être émise dans l'aquifère et ce, même après que l'aquitard soit entièrement formé. La consolidation de l'aquitard argileux pendant sa formation apparaît capable de transférer des volumes considérables d'eaux salées vers l'aquifère rocheux. De plus, les simulations numériques en 2D montrent que la pénétration de l'eau marine dans l'aquifère rocheux est fortement dépendante du taux de décroissance de la conductivité hydraulique avec la profondeur dans celui-ci. Elles révèlent également que de l'eau douce migrant vers le haut dans l'aquifère rocheux parallèlement à la plongée d'eaux marines sous l'effet de leur densité relative, peut s'accumuler à proximité de la base de l'aquitard. Mais surtout, elles montrent à quel point la digitation et l'entraînement densitaire des eaux salées introduites dans l'aquifère rocheux y sont des mécanismes d'invasion importants, et encore actifs aujourd'hui. Dans les zones plus élevées et libres d'argiles, le lessivage des eaux salées par la circulation convective d'eaux douces devient le processus prédominant dès le retrait des eaux inondantes, et mène à une évacuation quasi complète des eaux marines précédemment introduites dans l'aquifère rocheux. À l'opposé, là où la couverture argileuse est épaisse, le lessivage de l'aquifère rocheux s'avère quasi nul. Néanmoins, il s'avère que c'est principalement la diffusion qui contrôle l'évolution post-marine de la salinité maximale pouvant être rencontrée dans la partie supérieure du système aquifère, principalement en évacuant peu à peu son stock de salinité vers la surface. Les résultats montrent, en outre, qu'il est fort probable que les eaux profondes de la Mer de Champlain aient eu une salinité marine normale (~35 g/L) durant la plus grande partie de l'épisode marin, ce qui est en contradiction avec des travaux antérieurs ayant affirmé que l'eau de la Mer de Champlain était diluée. Les salinités maximales observées aujourd'hui dans la zone d'eaux saumâtres en Montérégie Est (~12 g/L) ne seraient donc pas directement représentatives de la salinité d'une eau marine diluée au départ, mais plutôt le résultat de la longue évolution interne, et de la réduction associée, de la salinité au sein du système aquifère. Cette étude paléo-hydrogéologique contribue, en somme, à une meilleure compréhension des processus d'invasion marine des aquifères rocheux sous des paléoconditions réalistes.

Dès l'amorce de ce projet, il a été jugé nécessaire de disposer d'estimés de la conductivité hydraulique représentatifs des conditions régionales afin de reconstituer de façon plausible le processus d'invasion marine. Les résultats de nos travaux ont de fait montré l'importance critique de la conductivité hydraulique sur le processus d'invasion. En effet, même si l'aquitard argileux

exerce un contrôle majeur sur l'entrée puis la préservation d'eau marine dans l'aquifère rocheux sous-jacent, la profondeur d'invasion et, plus généralement, la distribution spatiale de l'eau marine dans l'aquifère apparaissent aussi largement contrôlées par la réduction de la conductivité hydraulique avec la profondeur, qui ne permet pas une pénétration profonde de l'eau marine. Le profil vertical de la conductivité hydraulique estimé dans le premier volet de la thèse (pour le contexte hydrogéologique de la Plate-forme du Saint-Laurent, dans lequel siègent les eaux souterraines saumâtres de la région d'étude) a fourni des salinités simulées de l'eau souterraine qui concordent avec celles observées dans l'aquitard argileux et l'aquifère rocheux. La nature imparfaite des données disponibles sur la capacité spécifique, la fiabilité limitée des estimations de transmissivité puis de conductivité hydraulique dérivées de celles-ci, les limites de nos connaissances sur la structure hydraulique de l'aquifère et notre reconstitution nécessairement simplifiée des paléoconditions imposent toutes, néanmoins, une marge d'incertitude à nos résultats. Enfin, nonobstant que cette étude soit basée sur des conditions spécifiques à une région, les méthodes développées et les processus étudiés devraient être généralement applicables à plusieurs des autres régions du monde ayant connu des conditions analogues et constituent donc, à notre avis, un progrès scientifique intéressant dans l'étude du phénomène d'invasion marine.

Mots clés

capacité spécifique ; transmissivité ; conductivité hydraulique ; solutions analytiques ; effet de l'emmagasinement dans le puits ; fiabilité ; erreurs dans les données d'entrée ; biais d'échantillonnage par les puisatiers ; aquifère rocheux fracturé ; modèle de propriétés des fractures ; simulation Monte Carlo ; paléo-hydrogéologie ; salinité ; modélisation numérique ; invasion marine ; Mer de Champlain

ABSTRACT

The understanding of the dynamics of large regional aquifer systems represents a scientific and technical challenge, yet such an understanding is required to support the sustainable management of groundwater resources. The sustainability of these resources is threatened by the potential impacts of climate change, especially for coastal aquifers where seawater invasion can occur due to relative sea level changes. The study of paleoconditions and the impact of major geological events on aquifers can shed light on some of the consequences of environmental conditions that may affect regional groundwater resources. In order to quantitatively understand the dynamics of aquifer systems and predict the impact of changes in their conditions, it is necessary to have estimates of their hydraulic properties that are regionally representative. In fractured sedimentary rock aquifers, such estimates must take into account the commonly observed decrease of hydraulic conductivity with depth. The work carried out in this thesis therefore aimed both to develop approaches providing better estimates of regional hydraulic conductivity and to use these estimates to study the impact of important changes in paleoconditions on groundwater salinity. The Montérégie Est region, in southern Quebec, Canada, offered the possibility to carry out such work, first because a recent regional groundwater resources assessment provided detailed information on its hydrogeological conditions. But more importantly, because the aquifer system in that region contains non-potable brackish groundwater over more than 2,000 km^2, which originates from the invasion of the St. Lawrence Valley by salt waters of the Champlain Sea, an arm of the Atlantic Ocean, about 13,000 years ago. The aquifer system thus offers an analog that can be used to study the long-term response of an aquifer system following the major perturbation related to a marine invasion.

The first part of the thesis focused on the hydraulic characterization of regional fractured-rock aquifer systems using readily available data from specific capacity tests. Specific capacity (SC) data from well-performance tests are commonly used to estimate transmissivity (T), especially in regional aquifer studies. Since SC data are much more abundant than time-drawdown data from aquifer tests, they can provide a more complete picture of the spatial variability of T within the aquifer. The conventional approach has been to use an analytical method based on the Theis solution for computing T estimates from the SC data, but limited work has been done to quantitatively assess the reliability of T(SC) estimates. The main objective of the work presented in chapter 6 was thus to assess the reliability and accuracy of T estimates derived from SC data by analytical methods. Two analytical T(SC) estimation methods were considered and rigorously

compared: the conventional Theis-based method and a new T(SC) estimation method based on the Papadopulos-Cooper (PC) solution, which accounts for wellbore storage contrary to the Theis solution. Results from this study reveal that the reliability of T(SC) estimates is actually limited and highly variable. T estimates are found to be quantitatively reliable only within a limited range of T, as a direct consequence of the inaccuracies (errors) in the input SC data. A case study for the Montérégie Est region demonstrates the great importance of considering the limited reliability and accuracy of T(SC) estimates when exploiting actual SC datasets, and thus exposes the potential misleading nature of results obtained from the conventional approach.

Regionally abundant specific capacity (SC) data are commonly used, then, to estimate hydraulic conductivity (K) of aquifers at the regional scale. Such data have notably been used before to infer vertical profiles of hydraulic conductivity (K_{b}) in fractured rock aquifers, which tend to be more fractured and permeable at shallower depths. The key objective of the work presented in chapter 7 was to develop a methodology to exploit T(SC) estimates for inferring regionally representative profiles of fracture properties and K_{b}, while accounting for the limited reliability of T(SC) estimates as well as the strong sampling bias induced by the conventional practices of the well drillers. For this purpose, a Monte Carlo simulation workflow involving two interacting models, a fractured-rock generation model and a drilling model imitating well-drillers' sampling bias, was developed. A simulation provides multiple realizations of heterogeneous fractured-rock aquifer columns and then computes the transmissivity of open-hole wells that would be drilled through these columns to either purely random (unbiased) depths, or non-random depths reflecting well-drillers' sampling bias. The workflow was applied to the fractured-rock aquifer system of the Montérégie Est area, for which 18,313 specific-capacity test data are available. The stochastic model was manually calibrated to reproduce observed depth-wise statistics about T and drilling depths, and then infer K_{b} profiles with depth and their uncertainty bounds, for each three distinct hydrogeological contexts of the region. Results show that the depth-decreasing trend of T commonly obtained through regional-scale analysis of SC data from a fractured-rock aquifer system is definitely an artifact of the well-drillers' sampling bias. Also, the heterogeneity of fracture apertures, and hence of fracture transmissivities, has a much larger impact on simulated biased well depths than the decrease in either average fracture aperture or fracture density. Thus, non-random well depths reflect both the well-drillers' sampling bias and the heterogeneity of the sampled arrangements of fractures, which can be deciphered through the implementation of our stochastic simulation approach.

The second part of the thesis focused on the paleo-hydrogeological study of the regional aquifer system of the Montérégie Est area, from the onset of the marine incursion by the Champlain Sea until present. The central objective of the work presented in chapter 8 was to better understand the processes involved in the marine invasion of aquifers under the paleoconditions prevailing in southern Quebec. This work was based on a conceptual model considering the temporal evolution of marine paleoconditions (water level and salinity), the formation through sedimentation of a clayey aquitard on the sea bottom, and a decrease in hydraulic conductivity with depth in the fractured rock aquifer. Processes governing the subsurface transport of salinity were investigated using models considering increasingly more complex and realistic conditions. The numerical models were prepared and simulated using either the R programming environment or the FEFLOW software. The subsurface transport of salinity was first studied with numerical 1D vertical models, and then the combined paleoconditions and processes involved were simulated in a 2D vertical cross-section representing schematically the study area. Results show a major impact, on the marine water invasion process, of the clay aquitard sedimentation on the sea bottom, not only during but also after the marine episode. The forming aquitard soon restricts direct marine invasion of the underlying rock aquifer. However, part of the salinity stored in the aquitard continue to be expelled in the aquifer, even after the formation of the aquitard is completed. Consolidation of the clay aquitard during its formation also appears to transfer significant volumes of saltwater to the rock aquifer. Moreover, the 2D numerical simulations show that the depth of seawater penetration in the rock aquifer strongly depends on the rate of decrease of hydraulic conductivity with depth. They also reveal that fresh groundwater migrating upward in parallel with the descent of seawater can accumulate right under the aquitard. More importantly, they highlight that density-driven fingering and sinking of the introduced saltwater are especially important marine-invasion processes, which are still active today, in the rock aquifer. In higher, clay-free areas, saltwater leaching by fresh groundwater is the dominant process in the rock aquifer following the retreat of the flooding waters, and leads to an almost complete removal of the previously introduced marine waters, whereas it is almost nonexistent where the clay cover is thick. Nevertheless, it is primarily the diffusion that controls the post-marine evolution of maximum salinity within the upper part of the aquifer system, mostly through progressive expulsion of the system's salinity content to the surface. Furthermore, this work shows that the deeper waters of the Champlain Sea most likely had a normal seawater salinity (~35 g/L) during most of the marine episode, which contradicts previous studies having concluded that water of the Champlain Sea was diluted. Present-day maximum observed salinities in the brackish groundwater zone of the Montérégie Est area (~12 g/L) would thus not be directly representative of an originally diluted seawater, but rather the result

of the long-term internal evolution and overall reduction of groundwater salinity within the regional aquifer system. In sum, this study provides a much better understanding of marine water invasion processes under realistic paleoconditions that could be applicable to other regions where postglacial marine invasions have occurred.

From the very start of this study, regionally representative hydraulic conductivity estimates were considered necessary to properly simulate the process of seawater invasion. Results clearly confirm that marine invasion of aquifer systems is indeed highly controlled by their hydraulic conductivity. Although the clay aquitard exerts a major control on the entry and later preservation of seawater in the aquifer, the depth of seawater invasion and, more broadly, its spatial distribution in the aquifer, appear to be primarily controlled by the reduction in hydraulic conductivity with depth, which does not allow the deep penetration of seawater. The vertical profile of hydraulic conductivity that was estimated in the first part of the thesis (for the St. Lawrence Platform hydrogeological context, in which sits the brackish groundwater zone of the study area) provided numerically-simulated groundwater salinities coherent with observations in both the clay aquitard and the aquifer. The imperfect nature of the available specific capacity data, the limited reliability of the transmissivity and then hydraulic conductivity estimates derived from them, the normal limitations of our knowledge about the actual aquifer system, and our simplified reconstruction of the paleoconditions, however, all lead to uncertainties in the results obtained. Finally, even though the study is based on actual field conditions of a specific region, the methods developed and processes studied are believed to be of general applicability to many other areas with analogous conditions.

Keywords

specific capacity; transmissivity; hydraulic conductivity; analytical solutions; wellbore storage effect; reliability; input data errors; well-drillers' sampling bias; fractured rock aquifer; fracture properties model; Monte Carlo simulation; paleo-hydrogeology; salinity; numerical modeling; marine invasion; Champlain Sea

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS v

AVANT-PROPOS ix

RÉSUMÉ xi

ABSTRACT xvii

TABLE DES MATIÈRES xxi

LISTE DES FIGURES xxvii

LISTE DES TABLEAUX xxxiii

CHAPITRE 1 : INTRODUCTION 1

1.1 Contexte de l'étude 1

1.2 Problématique 3

1.2.1 Limites des méthodes d'estimation de la transmissivité à partir de données de capacité spécifique 3

1.2.2 Limites de l'approche conventionnelle d'évaluation de la variabilité verticale de la conductivité hydraulique d'un aquifère rocheux fracturé à partir d'estimations de transmissivité en puits ouverts au roc 5

1.2.3 Déséquilibre entre l'état actuel du système aquifère régional et les conditions de surface contemporaines 6

1.3 Objectifs de la thèse 8

CHAPITRE 2 : RÉGION D'ÉTUDE 11

2.1 Localisation, physiographie et climat 11

2.2 Historique quaternaire régional 13

2.3 Sédiments superficiels 15

2.4 Contexte géologique du roc 19

2.5 Contexte hydrogéologique 19

2.6 Conditions d'écoulement souterrain actuelles 20
CHAPITRE 3 : CARACTÉRISATION HYDRAULIQUE 23
3.1 Méthodologie 23
3.1.1 Estimation de la transmissivité (T) à partir de données d'essais de capacité spécifique (SC) 23
3.1.2 Estimation de K_b(z) à partir d'un jeu de données de T(SC) 30
3.2 Résultats clés et discussion 35
3.2.1 Analyses d'incertitude des deux méthodes d'estimation de T(SC) 35
3.2.2 Estimations de T(SC) obtenues pour la région d'étude en tenant compte de leur fiabilité limitée 39
3.2.3 Estimation de K_b(z) à partir des estimations de T(SC) obtenues pour la région d'étude 42
CHAPITRE 4 : ÉTUDE PALÉO-HYDROGÉOLOGIQUE 47
4.1 Méthodologie 47
4.2 Résultats clés et discussion 50
CHAPITRE 5 : CONCLUSION 55
5.1 Sur la caractérisation hydraulique des systèmes aquifères fracturés 56
5.2 Sur l'étude paléo-hydrogéologique d'un système aquifère régional 59
5.3 Conclusion générale 61
CHAPITRE 6 : RELIABILITY OF TRANSMISSIVITY ESTIMATES FROM SPECIFIC CAPACITY DATA 65
Résumé 66
Abstract 67
1. Introduction 68
2. Structure of the manuscript 70
3. Theory 71
3.1 Description of specific capacity tests 71

3.2 Conventional method for T(SC) estimation, based on the Theis solution 74
3.3 New method for T(SC) estimation, based on the Papadopulos-Cooper solution 76
3.4 Dimensionless ratios used as diagnostic tools 78
3.5 Dimensionless solutions and type curves 80
3.6 Explanatory example of the forward and inverse solutions 83
3.7 Theoretical limit values for the input parameters of the T(SC) inverse solution 88
3.8 Definition of a minimum estimable actual-T threshold based on available drawdown ... 89
4. Sensitivity analysis of the two T(SC) estimation methods 94
4.1 Implementation 94
4.2 Results 95
5. Uncertainty analysis of the two T(SC) estimation methods 100
5.1 Implementation 103
5.2 Results 105
6. Application to the study area 114
6.1 Implementation 114
6.2 Results 120
7. Summary and conclusions 127
8. Acknowledgements 133
CHAPITRE 7 : REGIONAL-SCALE HYDRAULIC-CONDUCTIVITY VERTICAL PROFILES DERIVED FROM SPECIFIC CAPACITY TESTS IN FRACTURED ROCK AQUIFERS FREED FROM WELL-DRILLERS' SAMPLING BIAS 135
Résumé 136
Abstract 137
1. Introduction 138
2. Problem conceptualization 142
2.1 Well transmissivity estimates derived from specific capacity tests 142

2.2 Vertical profiles for well transmissivity and well density: biased vs. unbiased sampling 146

2.3 Influence of productive fractures on drilling operations 148

2.4 Models of fracture density and properties, and resulting bulk-rock hydraulic conductivity 152

3. Methodology for the Monte Carlo stochastic simulation 159

3.1 The stochastic modeling workflow 159

3.2 The stochastic model 166

4. Case study 177

4.1 Study area 177

4.2 Implementation of the methodology 179

4.3 Results 191

4.4 Applicability and limitations 214

5. Summary and conclusions 221

5.1 Flaws of the conventional approach 221

5.2 The new methodology proposed in this paper 221

5.3 General conclusion 223

6. Acknowledgements 224

CHAPITRE 8 : CONDITIONS PALÉO-HYDROGÉOLOGIQUES ET PROCESSUS D'INVASION PAR LA MER DE CHAMPLAIN D'UN SYSTÈME AQUIFÈRE ROCHEUX RÉGIONAL DU SUD DU QUÉBEC 225

Résumé 226

Abstract 228

1. Introduction 230

2. Méthodologie générale 233

3. Région d'étude 235

3.1 Localisation, physiographie et climat 235

3.2 Historique quaternaire régional....237
3.3 Sédiments superficiels....240
3.4 Contexte géologique du roc....243
3.5 Contexte hydrogéologique....243
3.6 Conditions d'écoulement souterrain actuelles....246
4. Conceptualisation du problème....247
4.1 La salinité et la densité des eaux....248
4.2 La période investiguée....250
4.3 Le système aquifère régional....251
4.4 Les paléoconditions....256
4.5 Les processus internes....264
5. Résultats de la modélisation des processus d'invasion marine du système aquifère rocheux....265
5.A Transport diffusif 1D dans l'aquitard....267
5.B Transport advectif-dispersif 1D dans l'aquitard....277
5.C Processus hydromécaniques et transport advectif 1D liés à la sédimentation-consolidation de l'aquitard....282
5.D Simulation 2D de l'invasion marine à travers l'aquitard et dans le système aquifère rocheux....290
6. Discussion et conclusion....310
7. Remerciements....315
RÉFÉRENCES....317
ANNEXES....337
Annexe A0.1 : Laurencelle et al. (2013) – Acte de conférence et affiche....339
Annexe A0.2 : Laurencelle et al. (2011) – Acte de conférence et diapositives....340
Annexe A0.3 : Laurencelle et al. (2014) – Diapositives....341
Annexe A0.4: Package of general-purpose R codes ("custom libraries" for R)....342

Annexe A6.1: Notation for Chapter 6 343

Annexe A6.2: Sample of the output T(SC) dataset produced in the case study..... 346

Annexe A6.3: Sensitivity of the quantitatively reliable range (QRR) to the reference values and error magnitudes used to prepare the “noisy” synthetic specific-capacity (SC) data set..... 348

Annexe A6.4: Package of R codes..... 349

Annexe A6.5: Datasets related to the case study..... 350

Annexe A7.1: The Upper Truncated Shifted Pareto distribution 351

Annexe A7.2: Special reference terms for the drilling submodel 352

Annexe A7.3: Statistics and quantitative indicators of goodness of fit considered for calibration of the stochastic model 355

Annexe A7.4: Sensitivity of the stochastic model to its numeric sub-parameters..... 356

Annexe A7.5: Main results obtained from the calibrated stochastic model after switching to the alternative ‘unbiased’ drilling mode 357

Annexe A7.6: Full set of graphical results from the Boolean parametric study 358

Annexe A7.7: Package of R codes..... 359

Annexe A7.8: Datasets related to the case study..... 360

Annexe A8.1 : Description mathématique du modèle de sédimentation-consolidation adapté de Wangen (1992)..... 361

Annexe A8.2 : Animations vidéos des résultats des simulations 2D de la Partie D 362

Annexe A8.3 : Codes sources des scripts en langage R et des plugins en C++..... 363

Annexe A8.4 : Données et modèles numériques liés à l’étude de cas 365

LISTE DES FIGURES

Figure 1 : Localisation de la région d'étude et ses contextes physiographiques 12

Figure 2 : Reconstitution paléogéographique de la Vallée du Saint-Laurent à différents stades clés pendant la dernière déglaciation..... 14

Figure 3 : Bloc-diagramme conceptuel de la région d'étude (topographie, hydrostratigraphie des dépôts meubles, socle rocheux et ses structures majeures et affleurements) 16

Figure 4 : Épaisseur actuelle en sédiments silto-argileux, délimitation de la zone d'eaux souterraines saumâtres, et limite marine diachronique de l'étendue de la Mer de Champlain, dans la région d'étude..... 18

Figure 5 : Représentation schématique du rabattement final à l'intérieur et autour d'un puits de pompage suite à un essai de capacité spécifique réalisé dans un aquifère captif idéal 24

Figure 6 : Représentation schématique du fonctionnement du modèle stochastique..... 33

Figure 7 : Résultats de l'analyse d'incertitude pour deux méthodes d'estimation de T(SC) 36

Figure 8 : Relation entre les valeurs de transmissivité zonées et la profondeur du puits..... 40

Figure 9 : Qualité du calage du modèle stochastique optimisé pour le contexte géologique de la Plate-forme du Saint-Laurent dans la région d'étude..... 43

Figure 10 : Prédictions relatives à la variabilité verticale de la conductivité hydraulique équivalente du système aquifère rocheux fracturé de la région d'étude, pour le contexte géologique de la Plate-forme du Saint-Laurent..... 45

Figure 11 : Illustration schématique de la conceptualisation du problème paléo-hydrogéologique 50

Figure 12 : Distribution spatiale de la salinité au sein du système aquifère régional simulée par le modèle numérique « D1 » du Chapitre 8, à : (a) *t* = 1.9 ka ; (b) *t* = 13.0 ka..... 51

Figure 13 : Comparaison des salinités simulées pour le temps actuel (*t* = 13 ka) aux salinités observées au site de Varennes pour l'aquitard argileux et dans la partie nord-ouest de la région d'étude pour l'aquifère rocheux supérieur..... 54

Figure 14: Schematic representation of the drawdown in and around a pumped well at the end of a specific capacity test conducted in an ideal nonleaky confined aquifer 73

Figure 15: Calculated type curves for a wide range of dimensionless inputs 81

Figure 16: Calculated final drawdown in the well for a wide range of “exact” transmissivities, using the Theis-based or Papadopulos-Cooper-based forward solution. 84

Figure 17: Estimated transmissivity as a function of final drawdown in the pumped well, using either Theis-based or Papadopulos-Cooper-based inverse solution. 86

Figure 18: Graphical explanation of the minimum estimable actual-transmissivity threshold concept 90

Figure 19: Results of the sensitivity analysis of T(SC) to independent variations of each of the input parameters 98

Figure 20: First series of graphical results of the uncertainty analysis of the two T(SC) estimation methods, expressed as a function of the “original” logT^* values 106

Figure 21: Second series of graphical results of the uncertainty analysis of the two T(SC) estimation methods, expressed as a function of the “estimated” log$T$ values 108

Figure 22: Bivariate kernel density estimate (2D KDE) plots summarizing the uncertainty analysis results for the two T(SC) estimation methods 111

Figure 23: Overview of the study area 115

Figure 24: Scatter plots of estimated transmissivity against well depth in rock 122

Figure 25: Scatter plots of inferred indications regarding actual transmissivity against well depth in rock 124

Figure 26: Well transmissivity estimates derived from specific-capacity test results 143

Figure 27: Main differences between vertical profiles of well density and average actual well transmissivity obtained from biased versus unbiased depth sampling of the rock aquifer system 147

Figure 28: Influence of fractured medium heterogeneity on transmissivity (controlling well yield) and thus water-well drilling depth 149

Figure 29: Models of fracture density and properties, and resulting bulk-rock hydraulics, as a function of depth in rock 153

Figure 30: Overview of the study area 179

Figure 31: Overview of the required input data, for the case study, presented in two forms: (a) scatter plots of inferred indications about actual well transmissivity against well depth in rock, and (b) scatter plots of raw $\log T_w$ estimates against well depth in rock, for each of the three main geological zones in the study area 182

Figure 32: Graphical presentation in two complementary ways of the $\log T_w, d_w$ input data to illustrate the implementation of the second step of the stochastic modeling workflow (Step W2) for one of the three zones of the study area: the St. Lawrence Platform 184

Figure 33: Empirical cumulative distribution functions (ECDF's) defining two of the three vertical-distance "Δz…") stochastic variables for each zone of the study area: (a) the local thickness of unconsolidated sediments overlying the rock aquifer, and (b) the local depth of the static water level relative to the ground 186

Figure 34: Decreasing trend of fracture density (fd) with depth in rock (z) derived from structural logging of 23 open boreholes drilled in the regional fractured-rock aquifer systems of Montérégie-Est and St-Édouard areas 187

Figure 35: Main graphical results of the calibrated stochastic simulation for each of the three zones of the Montérégie-Est extended area 192

Figure 36: Vertical profiles of well transmissivity simulated for each of the 16 tested scenarios from Table 18 202

Figure 37: Overview of the results of the parametric study of the main four Boolean parameters of the stochastic model, in the form of three groups of indicators 205

Figure 38: Arrangement of average fracture density (fd) with respect to both depth in rock (z) and well depth in rock (d_w), as obtained through special processing of the output data from runs of the stochastic model calibrated for the St. Lawrence Platform zone 210

Figure 39: Arrangement of average bulk-rock hydraulic conductivity (K_b) with respect to both depth in rock (z) and well depth in rock (d_w), as obtained through special processing of the output data from runs of the stochastic model calibrated for the St. Lawrence Platform zone 212

Figure 40 : Localisation de la région d'étude et ses contextes physiographiques 236

Figure 41 : Reconstitution paléogéographique de la Vallée du Saint-Laurent à différents stades clés pendant la dernière déglaciation 238

Figure 42 : Bloc-diagramme conceptuel de la région d'étude (topographie, hydrostratigraphie des dépôts meubles, socle rocheux et ses structures majeures et affleurements) 240

Figure 43 : Épaisseur actuelle en sédiments silto-argileux, délimitation de la zone d'eaux souterraines saumâtres, et limite marine diachronique de l'étendue de la Mer de Champlain, dans la région d'étude 242

Figure 44 : Décroissance de la conductivité hydraulique horizontale équivalente (K_b) moyenne avec la profondeur dans le système aquifère rocheux fracturé régional de la Montérégie Est, par grand contexte géologique 245

Figure 45 : Modèle conceptuel général du problème paléo-hydrogéologique à l'étude 248

Figure 46 : Résultats du modèle A1 : Transport strictement diffusif, seulement vers le toit de l'aquitard argileux 271

Figure 47 : Résultats du modèle A2 : Constitution du stock de salinité pendant la formation de l'aquitard argileux et transport strictement diffusif de cette salinité de l'aquitard argileux vers la surface et vers l'aquifère rocheux supérieur 276

Figure 48 : Résultats du modèle B1 : Constitution du stock de salinité pendant la formation de l'aquitard argileux et transport advectif-dispersif strictement vertical de cette salinité de l'aquitard argileux, vers la surface et vers l'aquifère rocheux supérieur 281

Figure 49 : Résultats « hydromécaniques » des modèles C1 et C2, illustrant l'évolution des surpressions et des propriétés dans l'aquitard argileux causée par le processus de sédimentation-consolidation 288

Figure 50 : Résultats « massiques » des modèles C1 et C2 : Constitution du stock de salinité pendant la formation par sédimentation-consolidation de l'aquitard argileux et transport purement advectif et strictement vertical de cette salinité, par expulsion de l'eau interstitielle de l'aquitard argileux vers la surface et vers l'aquifère rocheux supérieur 289

Figure 51 : Résultats du modèle D1 (décroissance normale de la K avec la profondeur dans l'AR) : Distribution spatiale de la salinité au sein du système aquifère régional pendant l'épisode marin, à : (a) t = 0.1 ka ; (b) t = 1.0 ka ; (c) t = 1.9 ka 299

Figure 52 : Résultats du modèle D1 (décroissance normale de la K avec la profondeur dans l'AR) : Distribution spatiale de la salinité au sein du système aquifère régional après l'épisode marin, à : (d) t = 3.0 ka ; (e) t = 6.5 ka ; (f) t = 13.0 ka 300

Figure 53 : Résultats du modèle D2 (décroissance ralentie de la K avec la profondeur dans l'AR) : Distribution spatiale de la salinité au sein du système aquifère régional pendant l'épisode marin, à : (a) *t* = 0.1 ka ; (b) *t* = 1.0 ka ; (c) *t* = 1.9 ka.....301

Figure 54 : Résultats du modèle D2 (décroissance ralentie de la K avec la profondeur dans l'AR) : Distribution spatiale de la salinité au sein du système aquifère régional après l'épisode marin, à : (d) *t* = 3.0 ka ; (e) *t* = 6.5 ka ; (f) *t* = 13.0 ka 302

Figure 55 : Évolutions spatiotemporelles de la salinité : (a) le long du tracé "T1", soit à l'intérieur de l'aquitard argileux ; (b) le long du tracé "T2", soit dans l'aquifère rocheux supérieur captif sous une épaisse couche d'argiles ; et (c) le long du tracé "T3", soit dans l'aquifère rocheux supérieur libre d'argiles ; d'après les modèles numériques D1 et D2 305

Figure 56 : Comparaison des salinités simulées pour le temps actuel (*t* = 13 ka) aux salinités observées au site de Varennes pour l'aquitard argileux et dans la partie nord-ouest de la région d'étude pour l'aquifère rocheux supérieur.....307

Figure 57 : Évolution temporelle de la salinité moyenne au sein de l'aquitard argileux d'une part, et de trois zones situées dans la partie supérieure de l'aquifère rocheux d'autre part 310

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1 : Valeur de référence et échelle d'erreur considérées pour chacun des paramètres d'essai dans les analyses d'incertitude 36

Tableau 2 : Matrices de confusion décrivant la qualité du classement, en trois zones de similitude, des transmissivités estimées (*T*) par rapport aux transmissivités originales correspondantes (*T* *), pour chacune des deux méthodes d'estimation 38

Tableau 3 : Système de classification des indications sur la T réelle (log *T* *) en huit classes de fiabilité de T(SC), utilisé dans la nouvelle approche d'exploitation de données de T(SC) 41

Table 4: Typical specific-capacity test parameters used in the theoretical part of this study 83

Table 5: Scheme for classification of SC tests based on the concept of limited "theoretical estimable range" (TER) for actual transmissivity (*T* *) 92

Table 6: Calculated dimensionless ratios, parameter thresholds, and theoretical drawdowns related to the two transmissivity scenarios considered in the sensitivity analysis. 96

Table 7: Common sources of errors in specific-capacity test (SC) data 101

Table 8: Deviation deltas used in the random error generation process to fix the 95th percentile of the Gaussian noise distribution of each parameter, for preparing the "noisy" SC data 104

Table 9: Classification scheme used for the transformation of the *T*/*T* * ratios numerical variable into a categorical variable of "signed estimation accuracy" levels prior to cross-tabulation computations 105

Table 10: Classification scheme used for the transformation of the T/T * ratios numerical variable into a categorical variable of "unsigned estimation accuracy" levels prior to cross-tabulation computations 105

Table 11: Confusion matrices computed for validating the plot-area division process underlying the classification of the *T* – *T* * difference data into zones of "qualitative similarity", for each of the two T(SC) estimation methods 112

Table 12: Summary of the prepared input SC data fields and of the source data fields imported from the regional database to prepare them for the purpose of the case study 116

Table 13: Classification scheme describing the eight classes of reliability that are used in the preparation and interpretation of the results of the Application section 121

Table 14: Steps of the stochastic modeling workflow..... 160

Table 15: Stochastic model flow chart 167

Table 16: Stochastic model parameters for the Monte Carlo simulation 174

Table 17: Considered range and calibrated values for the sub-parameters of the stochastic model 190

Table 18: Tested combinations (model scenarios) of the four selected Boolean parameters (BP's) of the stochastic model, all based on the optimized parameterization for the St. Lawrence Platform zone of the study area..... 199

Tableau 19 : Valeurs clés pour décrire l'évolution du niveau d'eau relatif (NER) régional sous la forme d'une série temporelle 257

CHAPITRE 1 : INTRODUCTION

1.1 Contexte de l'étude

La caractérisation hydrogéologique et l'étude des systèmes aquifères à l'échelle régionale sont des activités scientifiques en pleine expansion depuis une soixantaine d'années, à la fois dans les milieux universitaire et professionnel (Tóth, 2009). C'est toutefois principalement en milieux universitaire et gouvernemental que la dynamique naturelle des systèmes aquifères est investiguée à l'échelle régionale, le milieu professionnel répondant le plus souvent à des problématiques anthropiques à l'échelle de l'agglomération, de la municipalité, voire du particulier. Ainsi, les chercheurs sont régulièrement appelés à contribuer à l'acquisition puis à la diffusion de connaissances sur l'hydrogéologie de régions ciblées et même, lorsque les projets s'y prêtent, sur la dynamique des systèmes aquifères régionaux en général. D'ailleurs, une commission de l'Association internationale des hydrogéologues (AIH) s'intéresse spécifiquement aux différents aspects de l'écoulement régional de l'eau souterraine (*Regional Groundwater Flow Commission* : https://regionalgwflow.iah.org/).

Au Canada, la Commission géologique du Canada (CGC) a réalisé des projets visant à faire l'inventaire et la caractérisation des grands systèmes aquifères canadiens. Une partie des travaux de la CGC a été réalisée au Québec en collaboration avec le Ministère du Développement durable, de l'Environnement et de la Lutte contre les Changements Climatiques (MDDELCC) à partir de 1995. Ces projets avaient notamment le but de servir d'exemples pour la mise en place d'un programme systématique de cartographie régionale des ressources en eau souterraine. Le MDDELCC a aussi conçu la *Loi sur l'eau* qui affirme le caractère collectif des ressources en eau et implique donc la responsabilité de l'état d'assurer sa gestion durable. Dans cette logique, le MDDELCC a initié en septembre 2008 le Programme d'acquisition des connaissances sur les eaux souterraines (PACES) dont le but est de produire les connaissances permettant la gestion durable des ressources en eau souterraine dans les territoires municipalisés du Québec. La réalisation des projets régionaux soutenus par le PACES est assurée par les universités avec la participation de partenaires régionaux, notamment les municipalités régionales de comté et les organismes de bassin versant. Les universités impliquées dans la réalisation des projets PACES ont d'abord formé le Groupe de recherche interuniversitaire sur les eaux souterraines (GRIES) en

2009 afin de réaliser de façon concertée les projets régionaux du PACES et favoriser la collaboration entre les chercheurs, le personnel et les étudiants des différentes universités (Palmer *et al.*, 2011). Avec le soutien du Fonds de recherche du Québec – Nature et technologies (FRQNT), ces mêmes universités ont ensuite créé en 2011 le Réseau québécois sur les eaux souterraines (RQES : https://rqes.ca/) pour assurer les échanges entre les universités et l'ensemble des partenaires régionaux et provinciaux intéressés par les ressources en eau souterraine.

Dans la première des phases de réalisation des projets PACES entre 2009 et 2013, la Montérégie Est a fait l'objet d'un projet PACES dont le Centre Eau Terre Environnement de l'INRS (INRS-ETE) était responsable. La même région a fait en même temps l'objet d'un projet concerté de la CGC soutenu par son *Programme de cartographie des eaux souterraines*, notamment parce que la région d'étude comprend des aquifères transfrontaliers avec les États-Unis. L'équipe de projet de l'INRS ETE et de la Division Québec de la CGC a couvert conjointement plusieurs volets scientifiques relevant de différentes spécialités (Carrier *et al.*, 2013). Le projet a aussi comporté la réalisation de projets de recherche de maîtrise et de doctorat, dont celui qui est présenté ici.

Cette thèse de doctorat s'est intéressée essentiellement à deux volets connexes, la modélisation hydrogéologique du système aquifère de la région et la caractérisation hydraulique de son principal compartiment, l'aquifère rocheux fracturé. Assez tôt dans l'élaboration des recherches, le besoin d'investiguer l'évolution paléo-hydrogéologique du système aquifère de la région est apparu essentiel. Nous avons en effet pris connaissance de l'existence d'une vaste zone à l'intérieur de laquelle l'aquifère rocheux fracturé contient de l'eau saumâtre dont les salinités ou concentrations en matières dissoutes totales (MDT) peuvent atteindre jusqu'à 12 g/L (Beaudry *et al.*, 2018). Selon toute vraisemblance, cette salinité provient de la Mer de Champlain, une mer postglaciaire qui, de fait, a inondé la Vallée du Saint-Laurent de ses eaux salées pendant près de deux millénaires, vers la fin de sa déglaciation, il y a plus de 10 000 ans. Il a donc été décidé de centrer ces travaux de thèse sur la modélisation paléo-hydrogéologique de l'évolution du système aquifère régional depuis le début de l'épisode d'incursion marine par la Mer de Champlain jusqu'à aujourd'hui.

Or, pour mener à bien cet exercice de modélisation, il est essentiel d'acquérir d'abord une bonne connaissance des propriétés hydrauliques du système aquifère régional concerné. De plus, la couverture sédimentaire meuble étant somme toute modeste dans la partie nord-ouest de la région d'étude (à l'exception des épais dépôts d'argiles de la Mer de Champlain, dont les

propriétés hydrauliques sont bien établies dans la littérature), c'est essentiellement sur le système aquifère rocheux fracturé régional que doit se concentrer l'effort de caractérisation hydraulique.

1.2 Problématique

1.2.1 Limites des méthodes d'estimation de la transmissivité à partir de données de capacité spécifique

La conductivité hydraulique (K) est la propriété hydraulique de première importance pour la description quantitative des systèmes aquifères, et ce à toutes les échelles d'observation. En effet, la K contrôle à la fois les vitesses et directions d'écoulement de l'eau souterraine. C'est donc aussi une donnée d'entrée essentielle pour le paramétrage des modèles hydrogéologiques destinés à la simulation numérique de la dynamique d'écoulement des systèmes aquifères.

Or, dans le contexte particulier de la caractérisation hydraulique de systèmes aquifères rocheux à l'échelle régionale, il est généralement impossible en pratique d'obtenir des estimations locales de la K en nombre suffisant, et réparties de façon assez représentative dans la région d'intérêt, pour permettre une évaluation crédible de la variabilité spatiale de la K. Plutôt, la K est généralement dérivée d'estimations locales de la transmissivité (T) de l'aquifère, obtenues par l'interprétation d'essais de pompage. À l'échelle restreinte d'un site, destiné par exemple à l'installation de puits d'eau municipaux ou industriels, il est commun de réaliser plusieurs essais de pompage standards (à débit constant pendant une longue durée pouvant aller jusqu'à plusieurs jours), dont l'interprétation fournit des estimations de T de bonne fiabilité en général (Cooley & Naff, 1990). À l'échelle d'une région, toutefois, on trouve généralement très peu d'essais de ce type dans les bases de données, en raison des investissements requis en temps et en ressources (notamment financières) pour réaliser de tels essais. Pour ces mêmes raisons, il n'est pas envisageable de réaliser un nombre élevé d'essais de pompage spécialement pour les fins d'un projet de caractérisation hydraulique d'un système aquifère d'échelle régionale.

D'un autre côté, la productivité locale de l'aquifère peut être estimée en réalisant un essai de capacité spécifique (SC : de l'anglais "specific capacity"), aussi appelé essai de débit spécifique ou essai de productivité. Ce type d'essai est exécuté systématiquement par les puisatiers pour évaluer la capacité de production en eau des puits juste après leur construction. La capacité spécifique en tant que telle ($Q/s_{\mathrm{w.f}}$) est le rapport entre le débit de pompage (Q) et le rabattement

total à la fin de l'essai ($s_{\mathrm{w.f}}$) (Wilson, 2005). Un essai de SC est de courtée durée, plus simple et moins coûteux à réaliser comparativement à un essai de pompage d'aquifère standard. Puisque les essais de pompage d'aquifère standards, c'est-à-dire de longue durée, ne sont typiquement faits que lorsque des débits particulièrement élevés sont envisagés, et en raison du nombre beaucoup plus grand de puits d'eau résidentiels (à débits modestes) par rapport au nombre limité de puits d'eau municipaux et industriels (à débits plus élevés), les données d'essais de SC sont typiquement beaucoup plus abondantes et facilement disponibles que les données d'essais de pompage d'aquifère standards, à l'échelle régionale (Meier *et al.*, 1999; Mace, 2001). Utiliser les données de SC paraît donc avantageux du strict point de vue de la quantité de données disponibles.

Toutefois, la littérature évoque souvent le fait que l'interprétation des données d'essais de SC ne fournit des estimations de T qu'à l'ordre de grandeur près au mieux (Brown *et al.*, 1963; Mace, 2001). Il est tout de même recommandé d'utiliser ces estimations moins fiables de T issues des données de SC conjointement à celles plus fiables dérivées des essais de pompage standards, pour la caractérisation à l'échelle régionale (Mace, 2001). Leur utilisation combinée décuple le nombre de données tout en améliorant à la fois la répartition et la densité spatiales des données de T à l'intérieur de la région étudiée.

Nombre d'auteurs, après avoir examiné la corrélation entre T et $Q/s_{\mathrm{w.f}}$, ont proposé des formules empiriques pour estimer T à partir de $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ (ex. Razack & Huntley, 1991; Huntley *et al.*, 1992; Rovey & Cherkauer, 1995; Mace, 1997; Nastev *et al.*, 2004; Razack & Lasm, 2006; Srivastav *et al.*, 2007; Rotzoll & El-Kadi, 2008; Verbovsek, 2008; Richard *et al.*, 2016). Or, ces relations empiriques sont d'utilité limitée en dehors de la région d'étude d'origine, puisqu'elles sont spécifiques non seulement à l'environnement hydrogéologique testé mais aussi aux paramètres des essais ainsi qu'à la géométrie des puits.

Des méthodes analytiques ont aussi été développées pour estimer la T à partir des données d'un essai de SC. Ces méthodes ont l'avantage de considérer explicitement l'hydraulique de puits et les paramètres d'essai dans le processus d'estimation, constituant ainsi des outils d'estimation plus polyvalents. Cependant, en raison des nombreuses hypothèses simplificatrices requises par les solutions théoriques d'essais de pompage invoquées (Mace, 2001; Risser, 2010), ces méthodes ont des performances de valeur limitée et peuvent même mener à des résultats erronés lorsque le contexte hydrogéologique est complexe.

La méthode la plus couramment utilisée pour l'estimation de T à partir de données d'essais de SC (abrégé « T(SC) ») est la méthode analytique de Theis *et al.* (1963), qui est basée sur

l'approximation de la solution de Theis (1935) par Cooper & Jacob (1946) pour la prévision du rabattement dans un aquifère captif lors d'un essai de pompage en régime transitoire. Or, la fiabilité des estimations de T(SC) dérivées via cette méthode courante n'a toujours pas été examinée en profondeur. En particulier, l'effet de l'emmagasinement de l'eau dans le tubage du puits sur l'évolution du niveau dynamique au cours du pompage y est intrinsèquement ignoré. Or, on peut s'attendre à ce que cet effet soit généralement important dans les formations rocheuses, souvent assez peu perméables, considérant la courte durée des essais de SC (Papadopulos & Cooper, 1967; Risser, 2010). De plus, aucune recherche à ce jour n'a quantifié de façon méthodique l'incertitude des estimations de T(SC) découlant de l'imprécision des données de SC utilisées.

1.2.2 Limites de l'approche conventionnelle d'évaluation de la variabilité verticale de la conductivité hydraulique d'un aquifère rocheux fracturé à partir d'estimations de transmissivité en puits ouverts au roc

L'approche conventionnelle pour estimer la variabilité verticale de la K à partir de données de T(SC) consiste simplement à calculer K en divisant la T estimée par la longueur de l'intervalle ouvert du puits (b_{w}) et d'ensuite associer à chaque K ainsi calculée une coordonnée verticale (z) égale à la profondeur du milieu de l'intervalle ouvert (ex. Rivard *et al.*, 2008). Or, dans les aquifères rocheux fracturés, les puits sont généralement ouverts au roc, de sorte que la profondeur relative du puits par rapport au toit du roc (d_{w}) est approximativement égale à la longueur de l'intervalle ouvert, soit : $d_{\mathrm{w}} \approx b_{\mathrm{w}}$. Or, dans le cas commun de puits ouverts sur des formations où la distribution verticale des fractures productives en eau est hétérogène et présente de larges zones non productives, l'attribution « conventionnelle » de K à l'ensemble de la formation plutôt qu'aux seules zones productives, mène à une importante surestimation globale de K, au moins d'un point de vue théorique.

C'est en appliquant ladite approche conventionnelle qu'une tendance apparente à la décroissance de K, de T de la capacité spécifique $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ ou encore du rendement des puits, avec la profondeur (z) a été notée dans une multitude d'études hydrogéologiques d'aquifères rocheux fracturés à l'échelle régionale (ex. Davis & Turk, 1964; Merin, 1992; Gustafson & Krásný, 1994; Wei *et al.*, 1995; Wallroth & Rosenbaum, 1996; Wladis *et al.*, 1997; Nastev *et al.*, 2004; Saar & Manga, 2004; Rivard *et al.*, 2008; Boutt *et al.*, 2010; Lavigne *et al.*, 2010; Mortimer *et al.*, 2011; Carrier *et al.*, 2013; Chesnaux, 2013; Follin & Stigsson, 2013; Kuang & Jiao, 2014; Burns *et al.*, 2015; Lefebvre

et al., 2015; Ranjram *et al.*, 2015; Rutqvist, 2015). Dans ces études, la tendance décroissante observée a le plus souvent été interprétée comme étant essentiellement liée à des facteurs géologiques, telles l'altération de la roche, la densité et l'ouverture des fractures, qui sont de fait prédits par la théorie comme étant de plus en plus importants à l'approche du toit du roc.

Cependant, d'autres études ont mis en doute certains de ces résultats, en invoquant l'incohérence du traitement des données des SC et la manière avec laquelle la profondeur des puits est déterminée par les puisatiers selon le contexte hydrogéologique local (Loiselle & Evans, 1995). Ainsi, la décroissance de T avec la profondeur serait dans bien des cas le résultat d'un biais lié aux pratiques courantes des puisatiers (ou « biais d'échantillonnage par les puisatiers »). D'après ce concept clé, les puits profonds forés par les puisatiers sont dans l'ensemble moins productifs que les puits peu profonds forés par les puisatiers, parce que le forage est généralement poursuivi jusqu'à ce que la productivité recherchée soit atteinte, ou sinon jusqu'à une certaine profondeur maximale à laquelle il est de toute façon décidé d'arrêter le forage et de se contenter d'un puits de faible productivité (Knopman & Hollyday, 1993; Wladis *et al.*, 1997).

Or, si la littérature explique assez bien les causes, la nature et les inconvénients de ce biais en termes d'exploitabilité des données de T, aucune méthode opérationnelle n'a encore été publiée pour évaluer la variabilité verticale de la K d'un aquifère rocheux fracturé régional en tenant compte du biais d'échantillonnage lié aux pratiques courantes des puisatiers.

1.2.3 Déséquilibre entre l'état actuel du système aquifère régional et les conditions de surface contemporaines

Dans la région d'étude de la Montérégie Est, le système aquifère rocheux régional contient actuellement des eaux souterraines saumâtres sur une vaste zone s'étendant sur plus de 2 000 km^2, et ce dès de faibles profondeurs (Beaudry *et al.*, 2011; Carrier *et al.*, 2013; Beaudry *et al.*, 2018). L'origine principalement marine de la salinité élevée des eaux souterraines dans cette zone ainsi que dans d'autres secteurs des environs a été confirmée par des études hydrogéochimiques et attribuée à l'épisode d'incursion marine postglaciaire de la Mer de Champlain dans la Vallée du Saint-Laurent (Cloutier *et al.*, 2006; Beaudry *et al.*, 2018). Les travaux de Beaudry *et al.* (2011) ont également montré que la distribution de ces eaux saumâtres peut être en partie mise en relation avec certaines informations géographiques clés décrivant l'environnement actuel. En particulier, leur étude a mis en évidence : i) que la présence d'eaux souterraines saumâtres est fortement corrélée avec la présence d'une épaisse couverture de sédiments silto-argileux très peu

perméables (les argiles de la Mer de Champlain) et d'une topographie du roc peu accentuée; ii) que l'extension actuelle de la zone d'eaux souterraines saumâtres s'avère beaucoup plus limitée que celle de l'extension maximale des surfaces ayant jadis été inondées par les eaux marines de la Mer de Champlain, et; iii) que cette zone saumâtre ainsi que les échantillons d'eau souterraine à salinité significative sont entièrement contenus à l'intérieur du territoire jadis inondé par cette mer. Autant d'indices qui renforcent la thèse de l'origine marine de ces eaux souterraines saumâtres. En outre, l'analyse hydrogéochimique de ces eaux a montré que leurs salinités actuelles sont nettement inférieures à la salinité moyenne des océans (~35 g/L), tant dans le roc que dans les sédiments silto-argileux sus-jacents (~0–15 g/L) (Desaulniers & Cherry, 1989; Cloutier *et al.*, 2006; Cloutier *et al.*, 2010; Beaudry *et al.*, 2011; Beaudry *et al.*, 2018). Plusieurs hypothèses ont été proposées dans la littérature pour expliquer ce fait. Certains auteurs ont avancé que la salinité des eaux de la Mer de Champlain devait avoir été du même ordre que la salinité maximale actuellement observée dans les secteurs hydrauliquement isolés des systèmes aquifères régionaux de la Vallée du Saint-Laurent, et ils en ont conclu que la Mer de Champlain devait être un mélange composé d'environ 1/3 d'eaux salées en provenance du Golfe du Saint-Laurent, et de 2/3 d'eaux douces associées à la fonte glaciaire ainsi qu'aux précipitations (Desaulniers & Cherry, 1989; Cloutier *et al.*, 2010). D'autres études hydrogéologiques ont cependant infirmé cette hypothèse en montrant, à l'échelle locale de quelques sites d'étude, que la salinité souterraine des systèmes aquifères de la Vallée du Saint-Laurent aurait en fait évolué de façon importante depuis sa mise en place, et ce y compris dans les unités silto-argileuses très peu perméables, par migration diffusive ou advective-dispersive des solutés introduits dans les systèmes aquifères lors de l'invasion marine des basses terres (Benabdallah, 2010). Une migration prolongée de la salinité souterraine pourrait effectivement expliquer pourquoi même les salinités maximales observées aujourd'hui dans la zone d'eaux saumâtres en Montérégie Est demeurent nettement inférieures à la salinité des océans sans impliquer nécessairement que la Mer de Champlain ait eu une salinité inférieure à la salinité des océans.

En somme, l'état actuel des connaissances scientifiques relatives à la salinité notable des eaux souterraines des aquifères rocheux en plusieurs secteurs de la Vallée du Saint-Laurent se résume essentiellement à leur caractérisation géographique et hydrogéochimique factuelle et contemporaine. À notre connaissance, aucune étude n'a à ce jour investigué quantitativement la dynamique d'introduction puis l'évolution de la salinité marine jusqu'à aujourd'hui dans un système aquifère régional entier (aquifère rocheux et aquitard argileux sus-jacent) ayant été jadis inondé par une mer transgressive postglaciaire en général, et plus particulièrement par la Mer de Champlain.

1.3 Objectifs de la thèse

À la lumière des problématiques présentées ci-avant, deux volets d'étude principaux se dégagent et font l'objet de cette thèse :

Premier volet : Les objectifs du premier volet, consacré à la caractérisation hydraulique des systèmes aquifères fracturés, sont les suivants :

a) Comparer la fiabilité et la précision de deux méthodes analytiques d'estimation de la transmissivité (T) à partir de données d'essais de capacité spécifique (SC) : la méthode conventionnelle basée sur la solution classique de Theis (1935), et une autre méthode basée sur la solution de Papadopulos-Cooper (1967) qui tient compte de l'emmagasinement de l'eau dans le puits pompé.

b) Développer une méthodologie opérationnelle permettant de caractériser la variabilité verticale de la conductivité hydraulique (K) d'un système aquifère rocheux par l'exploitation de jeux de données d'essais de SC et qui tienne compte de la fiabilité limitée ainsi que du biais d'échantillonnage inhérents à ce type de données.

c) Appliquer la méthodologie développée pour caractériser la variabilité verticale de la K du système aquifère rocheux de la Montérégie Est, dans la Vallée du Saint-Laurent, et comparer les résultats à ceux obtenus par l'approche de caractérisation conventionnelle.

d) Formuler des recommandations sur la marche à suivre pour exploiter mieux les jeux de données d'essais de SC, tout en exposant les forces et les faiblesses de l'approche conventionnelle ainsi que de la nouvelle méthodologie développée.

Second volet : Les objectifs principaux du second volet, consacré à l'étude paléo-hydrogéologique de la dynamique du système aquifère régional de la Montérégie Est, du début de l'épisode d'incursion marine par la Mer de Champlain jusqu'à aujourd'hui, sont les suivants :

a) Reconstituer quantitativement l'évolution postglaciaire de la dynamique d'écoulement des eaux souterraines et de la migration associée de la salinité dans le système aquifère régional de la Montérégie Est.

b) Déterminer les processus clés ayant contrôlé cette évolution, en étudiant notamment le rôle de l'aquitard argileux déposé sur le fond marin pendant et après sa formation, et en considérant les effets de la densité variable dus à la salinité élevée des eaux marines introduites dans le système.

c) Fournir une explication quantitative de la salinité actuelle des eaux souterraines dans le système aquifère régional.

d) Améliorer la connaissance scientifique générale sur les effets que peuvent avoir les transgressions-régressions marines de grande amplitude sur les systèmes aquifères régionaux.

CHAPITRE 2 : RÉGION D'ÉTUDE

2.1 Localisation, physiographie et climat

La région d'étude, appelée Montérégie Est, se situe dans le Québec méridional, à l'est de l'Île de Montréal (Figure 1). La région d'étude comprend pratiquement tout le territoire couvert par les bassins versants des rivières Yamaska et Richelieu (ce dernier dans sa portion québécoise seulement), soit une superficie totale d'environ 9 000 km^2. Nos travaux paléo-hydrogéologiques, toutefois, se concentrent sur le bassin versant de la rivière Yamaska.

La région est divisible en quatre contextes physiographiques (Figure 1) : trois contextes étendus se suivent, d'ouest en est (les Basses-terres du Saint-Laurent, le Piémont appalachien, puis les Hautes-terres appalachiennes) tandis qu'un quatrième contexte (composé des collines montérégiennes) perce ceux-ci à plusieurs endroits (Carrier *et al.*, 2013). Les Montérégiennes de la région d'étude, au nombre de sept, sont une suite de collines distantes d'environ 10 à 25 km et suivant un axe général ONO-ESE dont les altitudes maximales vont d'environ 200 à 550 m. L'élévation du sol au sein de chacun des trois contextes physiographiques varie de 10 à 60 m dans les Basses-terres, de 60 à 110 m dans le Piémont, et de 110 m à 960 m dans les Hautes-terres (Carrier *et al.*, 2013). Le réseau hydrographique est beaucoup plus dense dans les Appalaches que dans les Basses-terres, en lien avec le relief plus accidenté de ce contexte. L'exutoire régional ultime du réseau de drainage de surface de la région (et donc des rivières majeures Yamaska et Richelieu) est le fleuve Saint-Laurent, dont la rive droite délimite le nord de la zone d'étude.

Le climat de la région est de type continental humide avec, en termes de normales climatiques, des températures mensuelles moyennes passant de -12 °C en janvier à +21 °C en juillet (soit une température annuelle moyenne d'environ +6 °C) et des précipitations totales mensuelles variant assez peu, entre 50 à 100 mm en moyenne (pour un total annuel moyen d'environ 1100 mm/an) (Carrier *et al.*, 2013). Les précipitations se font principalement sous forme de pluie, sauf de décembre à janvier où c'est la forme nivale qui domine. Le ruissellement de surface ainsi que l'infiltration des eaux de surface dans le sol sont plus importants au printemps (de mars à avril), période qui concentre près de la moitié des flux totaux annuels, en lien avec la fonte des neiges accumulées au cours de l'hiver associée au dégel rapide du sous-sol (Carrier *et al.*, 2013).

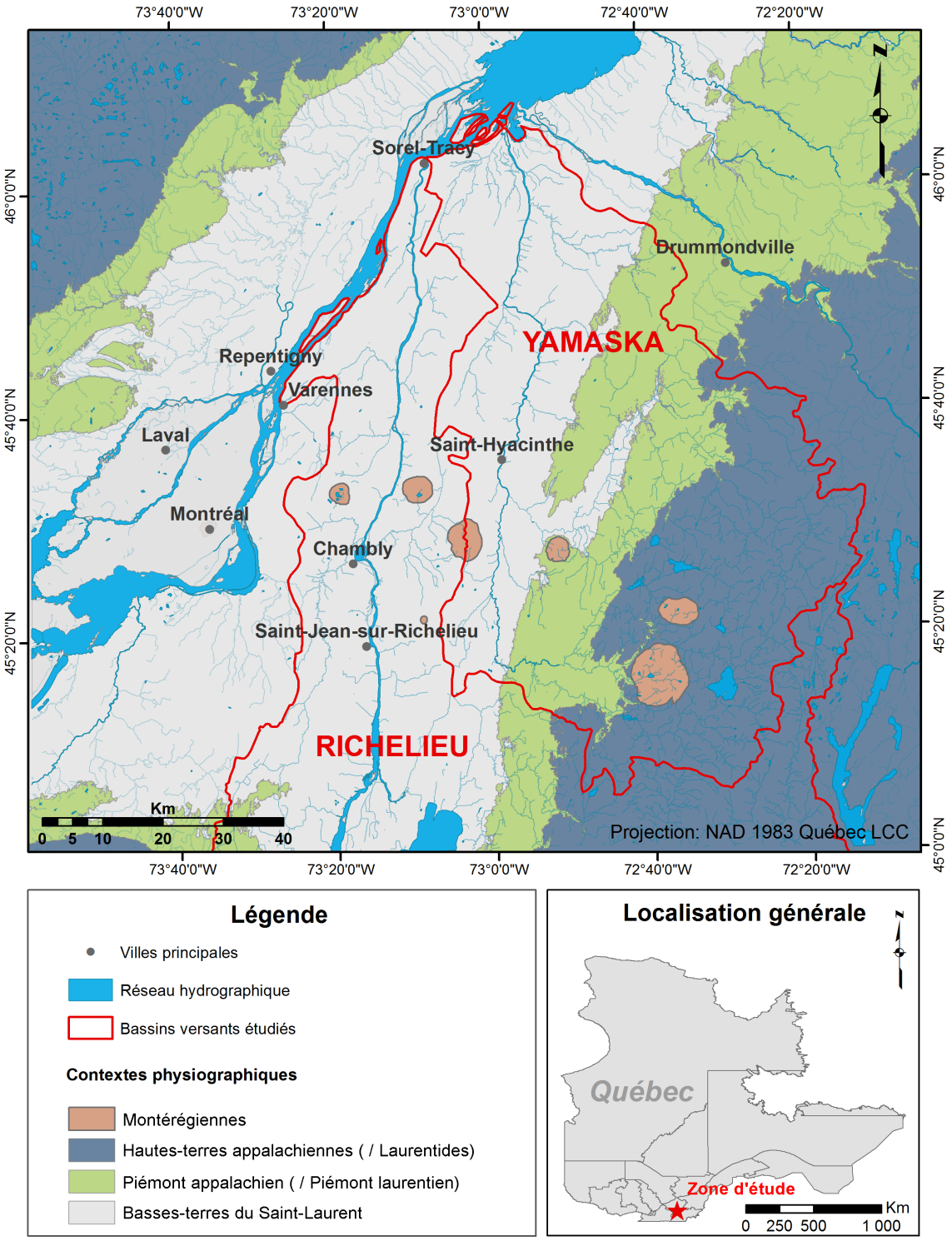


Figure 1 : Localisation de la région d'étude et ses contextes physiographiques. Basé sur données cartographiques tirées de Carrier *et al.* (2013).

2.2 Historique quaternaire régional

Au dernier maximum glaciaire (DMG), autour de 20 à 18 ka ^{14}C BP (26 à 21 ka cal BP) (Dyke, 2004; Peltier & Fairbanks, 2006; Stokes *et al.*, 2012; Peltier *et al.*, 2015), le front glaciaire de l'Inlandsis laurentidien s'écoulait tranquillement vers le sud-sud-est, au niveau de la région d'étude (Figure 2a). S'ensuivit une déglaciation rapide de la Vallée du Saint-Laurent dans son ensemble, d'abord liée au départ d'importants volumes de glace aux marges orientales de l'Inlandsis par vêlage d'icebergs destinés au Golfe du Saint-Laurent. Ces pertes de glace ont en effet induit un courant glaciaire majeur suivant l'axe nord-est de la Vallée du Saint-Laurent (Figure 2b), lequel a canalisé et accéléré les écoulements glaciaires vers et dans celui-ci, surtout à partir de l'actuel lac Saint-Pierre tout juste au nord-est de la région d'étude (Occhietti *et al.*, 2001b). Ce régime d'ablation accélérée, d'environ 15 à 12 ka ^{14}C BP (17 à 14 ka cal BP), en amincissant la glace dans sa zone d'influence, a progressivement isolé les glaces se trouvant au sud de l'axe du Saint-Laurent (Occhietti *et al.*, 2001b). Durant cette période, la vitesse de recul apparent de la marge glaciaire méridionale aurait été en moyenne d'environ 200 m/an ^{14}C dans la Vallée du Saint-Laurent, contre 250 m/an ^{14}C en contexte appalachien (Occhietti & Richard, 2003). Le glacier résiduel appalachien s'est ainsi trouvé de plus en plus indépendant du glacier principal évoluant séparément au nord de l'axe du Saint-Laurent (dit Dôme du Nouveau Québec), avec des écoulements divergents vers le Maine (É.-U.), au sud, et vers l'axe du Saint-Laurent, au nord (Figure 2b) (Occhietti *et al.*, 2001b).

La déglaciation s'est encore accélérée durant le réchauffement de Bölling (12.5 – 12.2 ka ^{14}C BP, soit vers 14 ka cal BP) alors que le bilan de masse de l'Inlandsis laurentidien devenait fortement négatif ou, en d'autres mots, que le Dôme du Nouveau-Québec ne parvenait plus à compenser les pertes de glace associées au courant glaciaire et à la fonte accrue des glaces (Occhietti *et al.*, 2001b). L'accumulation d'eaux de fonte au front des glaciers a d'ailleurs mené à la formation de plusieurs lacs glaciaires dans la partie occidentale de la Vallée du Saint-Laurent (lacs Iroquois, Vermont et Memphrémagog), dont l'union éventuelle a formé le lac glaciaire Candona, lequel a occupé les secteurs déglacés de la partie sud de la région d'étude (principalement dans les Appalaches) jusqu'à ce que la récession glaciaire ouvre finalement la partie occidentale de la Vallée du Saint-Laurent à la mer (Figure 2c) (Parent & Occhietti, 1999).

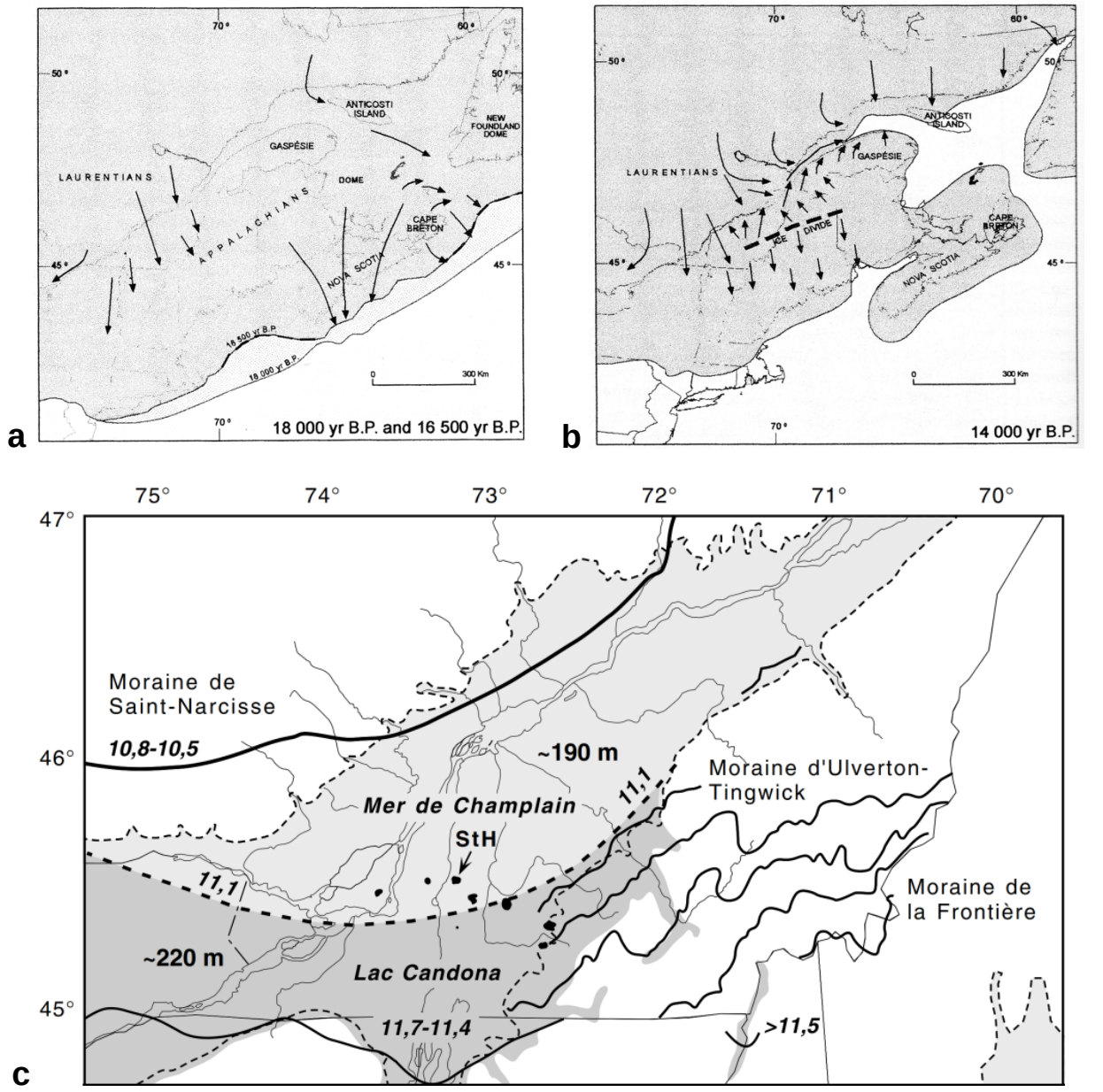


Figure 2 : Reconstitution paléogéographique de la Vallée du Saint-Laurent à différents stades clés pendant la dernière déglaciation. Les âges sont exprimés en ka ^{14}C BP conventionnels. (a) et (b) : Schémas tirés de Occhietti *et al.* (2001b) illustrant l'englacement de la vallée aux âges notés dans le coin inférieur gauche. (c) Schéma chronologique tiré de Occhietti & Richard (2003) où plusieurs limites clés sont tracées avec leur âge associé. 'StH' indique le mont Saint-Hilaire. Deux niveaux d'eau relatifs y sont également notés, en gras.

L'invasion marine de la région d'étude par la Mer de Champlain a débuté vers 11 ka ^{14}C BP (13 ka cal BP) (Occhietti & Richard, 2003). La mer a dès lors inondé les terres d'élévations basses à intermédiaires, jusqu'à une limite marine diachronique correspondant à des élévations actuelles

de paléorivages ou, autrement dit, de « niveaux d'eau relatifs » allant de 170 à 190 m dans la région d'étude (Parent & Occhietti, 1988). Bien qu'il n'y ait pas encore de consensus en la matière, la salinité initiale des eaux de la Mer de Champlain apparaît plus vraisemblablement voisine de la salinité de l'océan atlantique, environ entre 25 et 35 g/L (Rodrigues, 1992; Guilbault, 1993). La salinité des eaux de la Mer de Champlain aurait éventuellement diminué au cours de l'épisode marin. L'interprétation des assemblages de foraminifères trouvés dans les sédiments de la région d'étude en termes de paléosalinités suggère en effet des phases marines tardives avec des salinités de 10 à 25 g/L, puis d'aussi peu que 2 à 10 g/L (Guilbault, 1993). L'épisode marin se serait terminé vers 9.5 à 9.8 ka ^{14}C BP (11 ka cal BP) (Occhietti *et al.*, 2001a). Le niveau d'eau relatif des eaux inondant la région d'étude à la toute fin de l'épisode marin aurait été d'environ 60 à 70 m, d'après les courbes de niveau d'eau relatif produites pour des régions situées un peu plus en aval dans la Vallée du Saint-Laurent, soit pour la région du lac Saint-Pierre (Lamarche, 2005; Pelletier, 2008), la région de Québec (Lamarche, 2011) et la rive sud de l'estuaire du Saint-Laurent (Dionne, 2001). L'évolution post-Champlain du réseau de drainage de la partie occidentale de la Vallée du Saint-Laurent a débuté par le Lac à Lampsilis, épisode lacustre pendant lequel le niveau d'eau relatif a diminué assez linéairement depuis les 60–70 m initiaux pour terminer à environ 20 m vers 8 ka ^{14}C BP (9 ka cal BP) (Lamarche, 2011). L'évolution hydrographique s'est poursuivie sous la forme d'un système fluviatile étendu dénommé Proto-Saint-Laurent, dont les niveaux d'eau relatifs ont diminué lentement jusqu'à moins de 10 m tout en fluctuant néanmoins de plusieurs mètres au gré des variations climatiques (Lamarche, 2011). L'évolution ultime du système fluviatile s'est complétée avec son rétrécissement jusqu'à correspondre à l'actuel fleuve Saint-Laurent, soit un niveau d'eau relatif contemporain d'environ 5 m (Pelletier, 2008; Lamarche, 2011).

2.3 Sédiments superficiels

On retrouve très peu de sédiments superficiels antérieurs à la dernière glaciation dans la région d'étude. En effet, les dépôts meubles présents ont essentiellement été amenés, créés ou déposés par l'Inlandsis laurentidien en mouvement, dans un premier temps, puis par les diverses inondations (glaciolacustres, marines, lacustres et fluviatiles), dans un second temps. Le bloc-diagramme conceptuel de la région d'étude présenté dans la Figure 3 montre les unités quaternaires principales dans leurs contextes physiographique et géologique.

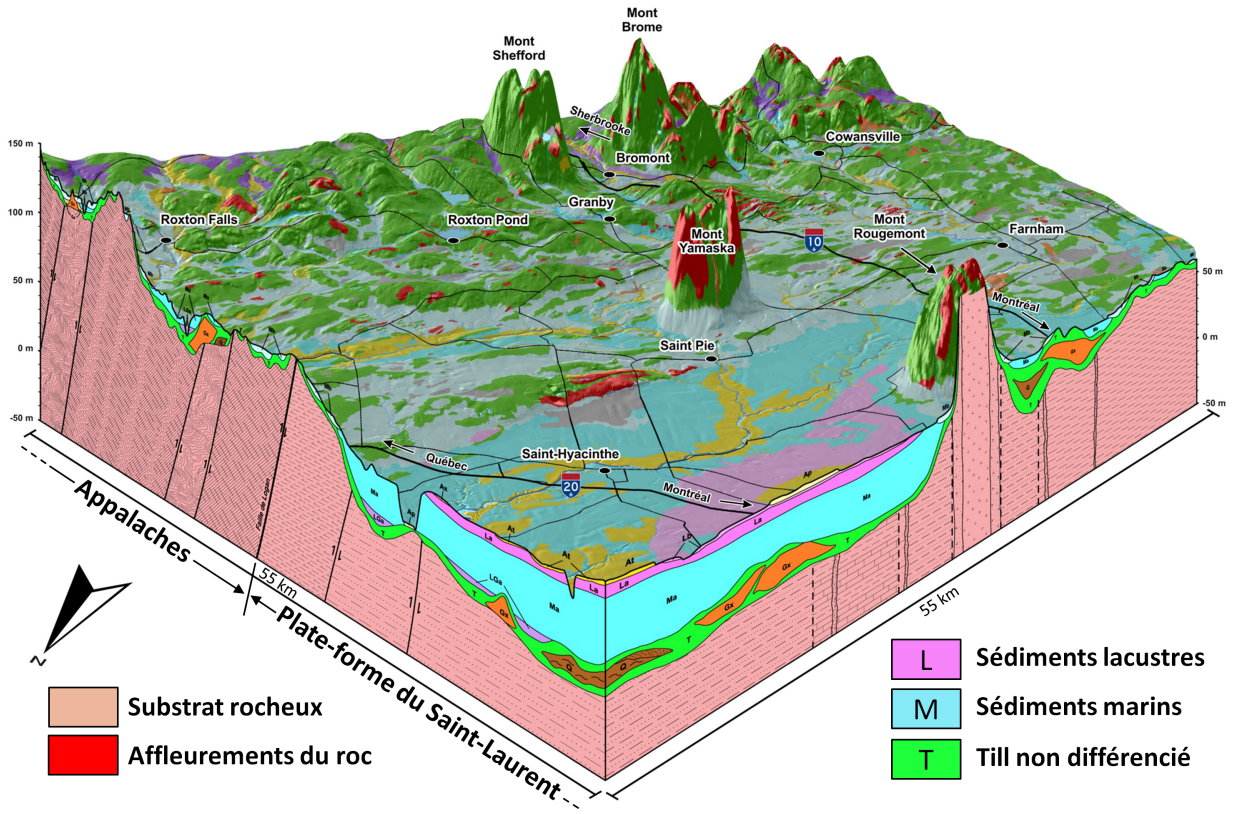


Figure 3 : Bloc-diagramme conceptuel de la région d'étude. Y sont représentés notamment la topographie, l'hydrostratigraphie des dépôts meubles, le socle rocheux et ses structures majeures et affleurements. Les provinces géologiques comprises dans la région d'étude sont également indiquées. Noter l'orientation particulière de la flèche indiquant le nord géographique. Exagération verticale de l'ordre de 100:1. Tiré de Carrier *et al.* (2013), avec légende simplifiée ajoutée.

La stratigraphie simplifiée des dépôts meubles recouvrant le socle rocheux, basée sur les travaux réalisés dans le cadre du projet PACES en Montérégie Est, s'organise comme suit (Carrier *et al.*, 2013; Dubé-Loubert *et al.*, 2014). Dans le secteur nord-ouest de la région, qui correspond au contexte physiographique des Basses-terres ainsi qu'à la zone d'eaux souterraines saumâtres mentionnée précédemment (Figures 1 et 4), on trouve d'abord, à partir du socle rocheux, quelques mètres de sédiments glaciaires (tills) qui recouvrent directement le socle rocheux de façon relativement homogène par tout le secteur. Ensuite, il y a localement des accumulations de sédiments fluvioglaciaires (ex. eskers) qui peuvent parfois avoir balayé le till sous-jacent. Puis, dans les secteurs où la topographie est sous la limite marine, il y a en bien des endroits une accumulation de sédiments silto-argileux d'eau profonde qui ont été déposés tout au long de l'épisode d'invasion marine des Basses-terres par la Mer de Champlain — d'où leur appellation usuelle d'argiles de la Mer de Champlain. L'épaisseur en sédiments silto-argileux est plus

importante aux endroits qui formaient des dépressions lors de l'épisode marin, notamment dans la partie nord-ouest de la région d'étude où l'épaisseur peut dépasser 30 m (au nord des Montérégiennes) (Figures 3 et 4). Il est d'intérêt de noter ici que les argiles de la Mer de Champlain sont en fait principalement constituées de farine glaciaire produite par l'action abrasive des glaciers et sont donc assez pauvres en minéraux proprement argileux (ex. phyllosilicates) (Leroueil *et al.*, 1983). Les argiles marines sont fréquemment recouvertes par une couche plus mince mais relativement continue d'argiles lacustres associées principalement au Lac à Lampsilis (Figure 3). Enfin, on trouve çà et là quelques accumulations mineures et discontinues de sédiments divers, alluviaux et organiques.

Différemment, dans les deux contextes physiographiques appalachiens du sud-est de la région d'étude, la couverture quaternaire est généralement très mince et principalement constituée de till (Figure 3), lequel a le plus souvent été remanié par l'action des vagues de la Mer de Champlain — dont les rivages atteignaient jadis ces élévations.

Puisque le volet paléo-hydrogéologique de la présente étude se concentre sur le bassin versant de la rivière Yamaska et s'intéresse plus précisément à la présence d'eaux souterraines saumâtres dans le secteur nord-ouest de la région (Figure 4), l'unité quaternaire d'intérêt principal du point de vue hydrogéologique est donc tout naturellement l'unité de sédiments fins déposés par la Mer de Champlain. En effet, cette unité domine clairement les autres unités quaternaires de la séquence stratigraphique du secteur, d'abord en termes d'épaisseur (Figure 4), mais aussi de par sa très faible conductivité hydraulique qui, comme il sera détaillé plus loin, confère un rôle d'aquitard à cette unité silto-argileuse d'origine marine postglaciaire.

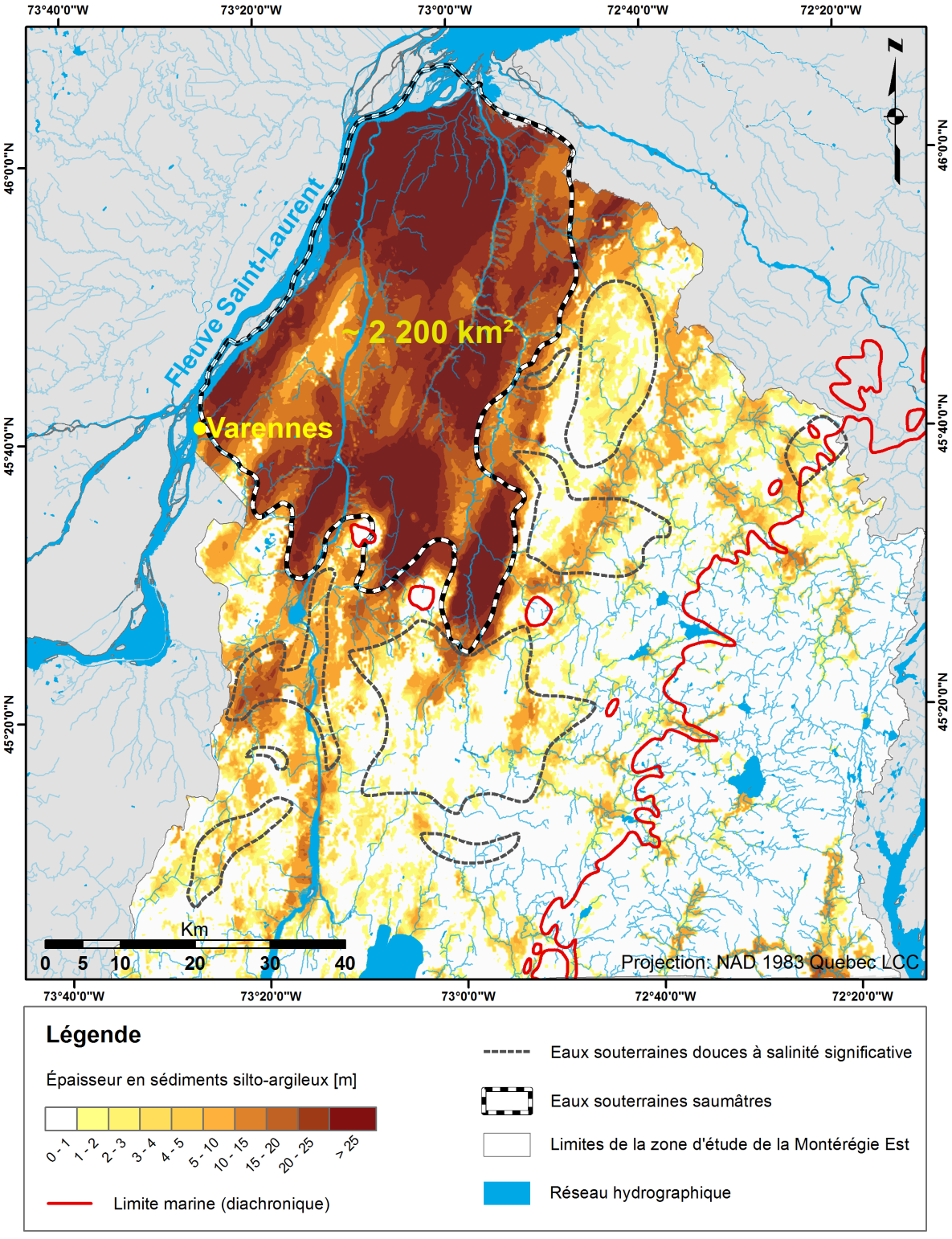


Figure 4 : Épaisseur actuelle en sédiments silto-argileux, délimitation de la zone d'eaux souterraines saumâtres, et limite marine diachronique de l'étendue de la Mer de Champlain, dans la région d'étude. Données tirées de Beaudry *et al.* (2011) et de Carrier *et al.* (2013).

2.4 Contexte géologique du roc

La région d'étude couvre deux provinces géologiques, la Plate-forme du Saint-Laurent (PFSL) et les Appalaches, séparées par un réseau complexe de failles de chevauchement appelé « ligne de Logan » (Globensky, 1987). De la même manière, la « faille de Brome-Bennett » sépare la province appalachienne en deux domaines tectonostratigraphiques principaux dans la région d'étude : la zone de Humber externe (à l'ouest de la faille de Bennett-Brome), qui correspond environ au contexte physiographique du Piémont, et la zone de Humber interne (à l'est de cette même faille), qui correspond d'assez près au contexte physiographique des Hautes-terres (Tremblay & Pinet, 2016). Les sept collines Montérégiennes de la région, constituées de roches ignées intrusives, percent pour certaines les formations rocheuses de la PFSL (monts Saint-Bruno, Saint-Hilaire, Saint-Grégoire, Rougemont et Yamaska) et pour d'autres celles des Appalaches (monts Shefford et Brome) (Thériault & Beauséjour, 2012; Carrier *et al.*, 2013).

Les formations rocheuses de la PFSL sont peu déformées et principalement constituées de shales, siltstones, dolomies, calcaires et grès. Les formations rocheuses des domaines appalachiens (externe puis interne) sont déformées de façon plus importante et partiellement métamorphisées, en lien avec les orogenèses taconique et acadienne qui ont abouti à la mise en place de ces « nappes de charriage à chevauchements répétés » constituant les actuelles Appalaches (Slivitzky & St-Julien, 1985; Carrier *et al.*, 2013). Les lithologies principales des roches appalachiennes sont en majorité semblables à celles de la PFSL, mais s'ajoutent toutefois des schistes et ardoises en raison du métamorphisme (Thériault & Beauséjour, 2012).

2.5 Contexte hydrogéologique

Les sédiments superficiels, essentiellement mis en place lors de la fin du dernier cycle glaciaire (voir Section 2.2), se traduisent en trois unités hydrostratigraphiques principales distinctes : les tills non remaniés et les argiles de la Mer de Champlain recouvrant le socle rocheux dans les Basses-terres, d'une part, et la mince couche de tills remaniés recouvrant le socle rocheux sur le Piémont appalachien. De façon générale, les tills non remaniés ont une conductivité hydraulique (K) assez faible, de l'ordre de 10^{-8} – 10^{-7} m/s, tandis que les tills remaniés ont une K accrue pouvant aller jusqu'à 10^{-4} m/s (Pontlevoy, 2004; Croteau, 2006). Les argiles de la Mer de Champlain ont, quant à elles, une K systématiquement faible, typiquement de l'ordre de 10^{-9} m/s sauf dans les premiers mètres de sa « croûte » superficielle où la K est accrue souvent jusqu'à 10^{-8} – 10^{-7} m/s

en raison de l'altération physique et chimique prolongée de ces sédiments depuis leur mise en place (Tavenas *et al.*, 1983; Lafleur *et al.*, 1987; Benabdallah, 2010). La porosité totale typique des tills est de l'ordre de 30 à 50 %, tandis que celle des argiles isolées de la surface est de l'ordre de 45 à 65 % (Desaulniers & Cherry, 1989; Benabdallah, 2010).

L'unité hydrostratigraphique des argiles de la Mer de Champlain, de par sa très faible K, sa forte épaisseur et sa continuité spatiale, impose des conditions captives au système aquifère rocheux sous-jacent dans la presque totalité de la partie nord-ouest de la région d'étude (voir Figure 4). Ailleurs dans la région, la couverture quaternaire étant généralement dominée par une mince couche de tills plus ou moins remaniés, le compartiment rocheux est nettement moins isolé hydrauliquement et donc le plus souvent en conditions semi-captives à libres. Les sédiments quaternaires de la région d'étude peuvent former en certains endroits des aquifères granulaires à bon potentiel d'exploitation, mais ne constituent pas des aquifères déterminants à l'échelle régionale en raison de leur petite dimension (Carrier *et al.*, 2013).

La « recharge » du système aquifère rocheux régional est naturellement plus importante là où la couverture quaternaire est relativement mince et perméable. La « recharge » au roc est estimée à près de 200 mm/an pour les Hautes-terres appalachiennes et les collines Montérégiennes, environ 100 mm/an pour le Piémont appalachien et la partie sud des Basses-terres du Saint-Laurent, contre < 15 mm/an presque partout dans la partie nord des Basses-terres — là même où il y a la vaste zone d'eaux souterraines saumâtres (Carrier *et al.*, 2013).

On trouve plus de 35 000 puits résidentiels dans la région d'étude, dont environ 90 % sont des puits ouverts au roc, d'après la base de données du gouvernement du Québec dénommée Système d'information hydrogéologique (SIH). Les puits résidentiels sont bien répartis sur le territoire à l'étude puisqu'ils sont installés à même les terrains des résidents. Le SIH s'avère la source de données de premier intérêt dans le cadre de la caractérisation hydraulique des aquifères rocheux de la région, puisqu'y sont colligées toutes les informations nécessaires à l'estimation de la transmissivité (T) au niveau des puits. En effet, une majorité des puits résidentiels rapportés (55 %) ont fait l'objet d'essais de capacité spécifique bien documentés.

2.6 Conditions d'écoulement souterrain actuelles

La piézométrie du système aquifère rocheux régional est fortement corrélée avec l'élévation de la surface du sol, dans l'ensemble ($R^2 \approx 0.99$), avec un écart moyen d'environ 3 m. Les tendances

régionales dans la surface piézométrique du roc suggèrent des écoulements en direction nord-ouest (plus au nord) à nord-nord-ouest (plus au sud). À une échelle subrégionale, les gradients hydrauliques sont très faibles dans le secteur nord-ouest de la région — là même où siègent les eaux souterraines saumâtres et un épais aquitard argileux — jusqu'à la rivière Yamaska, à l'est. Une augmentation marquée du gradient hydraulique est observée entre la rivière Yamaska et la ligne de Logan, révélant une zone de résurgence préférentielle au niveau même de ce tronçon de la Yamaska (Carrier *et al.*, 2013) (voir la prolongation du trace de la « faille de Logan » qui sépare les provinces géologiques dans la Figure 3 plus haut). Les collines montérégiennes, en lien avec leur rôle de zones de recharge préférentielles, alimentent des écoulements divergeant de façon à peu près radiale vers l'encaissant environnant, entretenant ainsi une piézométrie légèrement rehaussée autour d'elles (Carrier *et al.*, 2013). Les gradients hydrauliques sont dans l'ensemble plus élevés dans les deux contextes appalachiens, étant donné le fort contrôle topographique exercé sur la piézométrie. Par conséquent, la piézométrie du système aquifère rocheux dans les Appalaches reproduit assez fidèlement l'alternance de vallées et collines propre à ces paysages. De plus, l'interprétation des données hydrogéochimiques acquises dans la région d'étude, tout comme les résultats de modélisations hydrogéologiques numériques simples en coupes verticales 2D, semblent indiquer que les Appalaches entretiendraient un système d'écoulement d'extension principalement locale (des hauts topographiques vers les vallées environnantes) avec tout de même une composante plus régionale pouvant faire résurgence jusque dans le Piémont, voire dans la rivière Yamaska (Carrier *et al.*, 2013; Laurencelle *et al.*, 2013; Beaudry *et al.*, 2018). Donc, à moins que l'aquifère rocheux ait une anisotropie hydraulique verticale extrême (K_h/K_v de l'ordre de 100:1 ou plus), il est peu vraisemblable que les Basses-terres réceptionnent des écoulements d'extension régionale en provenance des Hautes-terres appalachiennes (Laurencelle *et al.*, 2013) (voir Annexe A0.1). Autrement dit, les systèmes d'écoulement souterrain des Basses-terres et des Hautes-terres appalachiennes seraient donc en grande partie indépendants hydrauliquement.

En somme, la région d'étude présente une histoire géologique récente ainsi que plusieurs caractéristiques intéressantes dans une perspective paléo-hydrogéologique.

CHAPITRE 3 : CARACTÉRISATION HYDRAULIQUE

Le premier volet de la thèse s'est intéressé à la caractérisation hydraulique du système aquifère rocheux fracturé régional de la région d'étude, la Montérégie Est. Toutefois, les travaux se sont tournés assez tôt vers le développement de nouvelles méthodes de caractérisation, plutôt que la simple application des méthodes existantes. Une démarche articulée en deux grandes étapes a été considérée. La première étape de développements méthodologiques de ce volet de la thèse s'est intéressée au problème de l'estimation de la transmissivité (T) à partir de données d'essais de capacité spécifique (SC) effectués de façon routinière par les puisatiers. La seconde étape s'est attaquée au problème de l'estimation de la variabilité verticale de la conductivité hydraulique (K) à partir des estimations de T(SC) obtenues à l'étape précédente.

Ci-après sont résumées, pour commencer, les méthodologies développées dans ce volet de la thèse (Section 3.1). Ensuite sont présentés les principaux résultats obtenus par l'application de ces méthodologies pour la région d'étude (Section 3.2).

3.1 Méthodologie

3.1.1 Estimation de la transmissivité (T) à partir de données d'essais de capacité spécifique (SC)

Dans un premier temps, une méthodologie originale a été développée qui permet d'évaluer la fiabilité des estimations de transmissivité T(SC) dans un contexte d'application pratique. Les sous-sections qui suivent en résument les principaux aspects. La présentation détaillée de la méthodologie, quant à elle, se trouve dans le Chapitre 6.

a. Les essais de capacité spécifique

Les essais de capacité spécifique sont assimilables à des essais de pompage à débit constant de très courte durée (typiquement, de 30 à 60 minutes) et sont le plus souvent effectués par des puisatiers lors de l'installation de nouveaux puits. La Figure 5 ci-dessous illustre la réponse d'un

aquifère idéal en termes de rabattement à la fin d'un essai de SC et identifie les principaux paramètres nécessaires à la description de l'essai.

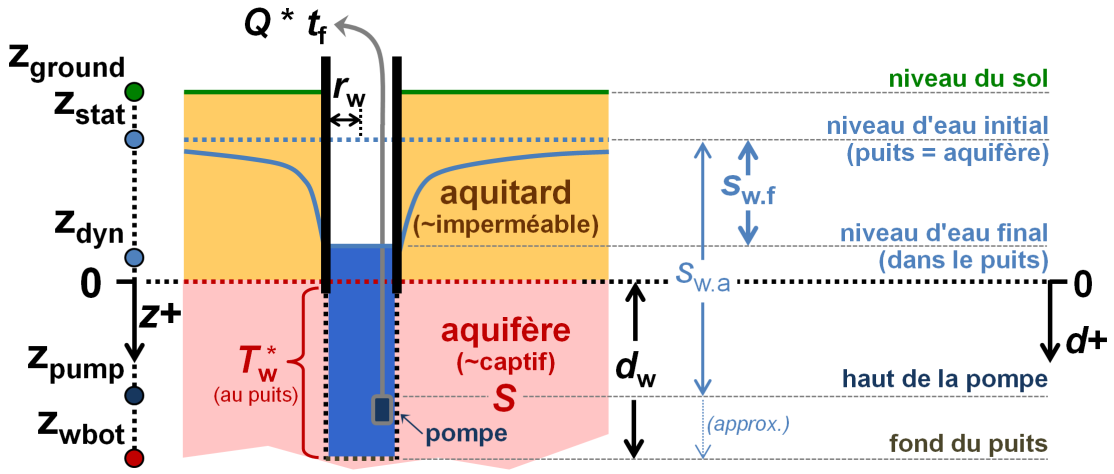


Figure 5 : Représentation schématique du rabattement final à l'intérieur et autour d'un puits de pompage suite à un essai de capacité spécifique réalisé dans un aquifère captif idéal (adapté de Papadopulos & Cooper, 1967).

Les paramètres principaux sont le débit de pompage (Q), la durée du pompage (t_f), le rabattement final dans le puits pompé à la fin de l'essai ($s_\mathrm{w.f}$), le rayon du puits (r_w) et enfin le coefficient d'emmagasinement de l'aquifère (S). La capacité spécifique en tant que telle est ainsi directement calculable à partir de ces paramètres, soit $Q/s_\mathrm{w.f}$. Le rabattement final ($s_\mathrm{w.f}$) est en fait l'écart entre les niveaux d'eau final (z_dyn) et initial (z_stat) : $s_\mathrm{w.f} \overset{\mathrm{def}}{=} z_\mathrm{dyn} - z_\mathrm{stat}$. La Figure 5 présente, en outre, deux paramètres additionnels qui sont nécessaires à la mise en œuvre de la méthodologie. Le premier est le « rabattement disponible » ($s_\mathrm{w.a}$) et correspond à la hauteur d'eau au-dessus du niveau de la pompe avant l'amorce du pompage : $s_\mathrm{w.a} \overset{\mathrm{def}}{=} z_\mathrm{pump} - z_\mathrm{stat}$. Le second est la profondeur du puits relativement au toit de l'aquifère (d_w). C'est à l'ensemble de ces paramètres principaux et additionnels que l'on réfère par la suite sous l'expression « données de SC » ou simplement « SC », la capacité spécifique au sens strict étant plutôt notée « $Q/s_\mathrm{w.f}$ ».

b. Méthode d'estimation conventionnelle (basée sur la solution de Theis)

La méthode conventionnelle pour l'estimation de T(SC) est basée sur l'approximation de Cooper-Jacob (CJ) de la solution de puits de Theis (Theis, 1935; Cooper & Jacob, 1946). La solution générale décrit le rabattement s à une distance d'observation quelconque r (par rapport au centre du puits à r = 0) induit dans un aquifère idéal (captif, homogène et isotrope, …) par un pompage de durée finie et à débit constant. De nombreuses hypothèses simplificatrices sont associées à la solution de Theis et à son approximation (Kruseman & de Ridder, 1990; ASTM, 2005; Duffield, 2016b). En particulier, la solution de Theis assume que l'emmagasinement dans le puits pompé est négligeable. Cette solution générale a été adaptée aux fins de la présente étude en utilisant comme distance d'observation le rayon du puits ($r = r_w$). L'Équation 1 présente ainsi la solution dite « directe » basée sur Theis (« Tb ») pour calculer le rabattement final d'un essai de SC à partir des autres paramètres de l'essai et d'une valeur donnée de transmissivité (T^*) :

$$s_{\mathrm{w.f}}(T^*, Q, t_{\mathrm{f}}, r_{\mathrm{w}}, S)_{\mathrm{Tb}} \cong \frac{Q}{4\pi T^*} \ln\left(\frac{2.25\, T^* t_{\mathrm{f}}}{{r_{\mathrm{w}}}^2 S}\right) \quad (1)$$

La transmissivité est estimée à partir des données d'un essai de SC en solutionnant le problème inverse, c.-à-d. en cherchant par optimisation la valeur de T^* dans l'Équation 1 qui permet de rendre la partie droite de l'équation égale à la valeur de $s_{\mathrm{w.f}}$ déclarée pour l'essai. La solution de ce problème inverse est facilement programmable, par exemple en suivant l'algorithme proposé par Bradbury & Rothschild (1985).

L'approche conventionnelle considère que la solution inverse ainsi définie, c.-à-d. la méthode d'estimation de T(SC) basée sur Theis, est directement utilisable pour l'estimation de T(SC).

c. Nouvelle méthode d'estimation (basée sur la solution de Papadopulos-Cooper)

Une nouvelle méthode d'estimation de T(SC) a été développée dans cette thèse, en un premier temps pour que la solution impliquée dans le processus d'estimation tienne compte de l'emmagasinement dans le puits pompé. La nouvelle méthode est basée sur la solution de Papadopulos-Cooper (PC), en tout point semblable à la solution de Theis à l'exception qu'elle tient compte de l'effet d'emmagasinement tel que souhaité ici. Elle est donc associée aux mêmes hypothèses simplificatrices que la méthode conventionnelle, mis à part celles liées à l'emmagasinement dans le puits. L'Équation 2 présente la solution directe basée sur PC (« PCb »)

pour calculer le rabattement final d'un essai de SC à partir des autres paramètres de l'essai et d'une valeur donnée de T^* :

$$s_{\mathrm{w.f}}(T^*, Q, t_{\mathrm{f}}, r_{\mathrm{w}}, S)_{\mathrm{PCb}} = \frac{Q}{4\pi T^*} F\left(u_{\mathrm{w}} = \frac{{r_{\mathrm{w}}}^2 S}{4T^* t_{\mathrm{f}}}, \alpha = S\right) \quad (2)$$

où $F(u_{\mathrm{w}}, \alpha)$ est une fonction analytique élaborée propre à la solution de PC (Papadopulos & Cooper, 1967), les autres paramètres ayant été définis précédemment (Section 3.1.1.b).

La solution de PC garantit, de plus, que le $s_{\mathrm{w.f}}$ calculé avec l'Équation 2 est toujours inférieur au rabattement maximal théoriquement possible ($s_{\mathrm{w.max}}$) spécifique aux paramètres de l'essai, peu importe la T^*, tel qu'exprimé par :

$$s_{\mathrm{w.f}}(\ldots)_{\mathrm{PC}} < s_{\mathrm{w.max}}(\ldots) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{Q}{4\pi T^*}\left(\frac{\alpha}{u_{\mathrm{w}}}\right) = \frac{Qt}{\pi {r_{\mathrm{w}}}^2} \left(\equiv \frac{\text{volume total pompé}}{\text{aire section du puits}}\right) \quad (3)$$

À l'instar de la méthode conventionnelle, la transmissivité est estimée à partir des données d'un essai de SC en solutionnant le problème inverse. Cette nouvelle méthode d'estimation basée sur la solution de PC est exprimée symboliquement par la fonction : $T_{\mathrm{est}}(s_{\mathrm{w.f}}, Q, t_{\mathrm{f}}, r_{\mathrm{w}}, S)_{\mathrm{PCb}}$. Un algorithme de calcul a été conçu et programmé à cet effet, puisqu'aucune méthode numérique disponible n'en a été trouvée.

Toutefois, à la différence de l'approche conventionnelle d'exploitation de données de T(SC), la nouvelle approche proposée dans cette thèse ne considère pas que les estimations de T(SC) obtenues sont directement exploitables (statistiquement, par exemple). Certaines vérifications supplémentaires ont effectivement été ajoutées au processus d'estimation de T(SC) de façon à déterminer si l'estimation obtenue est quantitativement fiable ou non. Les deux sous-sections qui suivent présentent les aspects méthodologiques liés à ces vérifications.

d. Détermination de l'intervalle théoriquement estimable ("TER")

La première opération de vérification vise à évaluer si l'estimation de T(SC) a le potentiel d'être quantitativement fiable sur la base du rabattement final déclaré par le puisatier ($s_{\mathrm{w.f}}$). En effet, la profondeur d'un puits réel (d_{w}) étant nécessairement finie, il en va de même pour la hauteur d'eau disponible au rabattement ($s_{\mathrm{w.a}}$). Du fait de ce $s_{\mathrm{w.a}}$ limité, il existe une valeur minimale de T^* en-deçà de laquelle le puits pompé conformément aux paramètres de l'essai est vidé (jusqu'à la

pompe) avant la fin de l'essai, résultant en un niveau d'eau stabilisé à $s_{\mathrm{w.f}} \approx s_{\mathrm{w.a}}$. Si la T réelle de l'aquifère (T^*) est effectivement inférieure à la T minimale estimable $T^*_{\mathrm{me}}(s_{\mathrm{w.a}}, \dots)$ définie ci-après (Équation 4a), elle ne peut pas être estimée quantitativement, parce que l'estimation via $T = T_{\mathrm{est}}(s_{\mathrm{w.f}} \approx s_{\mathrm{w.a}}, \dots)_{\mathrm{PCb}}$ se bornera alors vers T^*_{me} plutôt que vers T^*. La première condition pour qu'une estimation de T(SC) soit potentiellement fiable est ainsi que $s_{\mathrm{w.f}} < (s_{\mathrm{w.a}} - \Delta)$, où $\Delta \geq 0$ m est un niveau de tolérance. À l'autre extrême, si la T^* est très élevée, $s_{\mathrm{w.f}}$ risque d'être trop faible pour pouvoir être mesuré correctement dans le puits. En effet, il y a nécessairement un rabattement minimal ($s_{\mathrm{w.f.min}}$) réel en-deçà duquel le rabattement final $s_{\mathrm{w.f}}$ est difficilement mesurable. La T^* maximale pouvant potentiellement être estimée quantitativement est donc $T^*_{\mathrm{mxe}}(s_{\mathrm{w.f.min}}, \dots)$ telle que définie ci-dessous (Équation 4b). La seconde condition pour qu'une estimation de T(SC) soit potentiellement fiable est donc que $s_{\mathrm{w.f}} \geq s_{\mathrm{w.f.min}}$.

$$T^*_{\mathrm{me}}(s_{\mathrm{w.a}}, Q, t_{\mathrm{f}}, r_{\mathrm{w}}, S) = T_{\mathrm{est}}(s_{\mathrm{w.f}} = s_{\mathrm{w.a}}, \dots)_{\mathrm{PCb}} \tag{4a}$$

$$T^*_{\mathrm{mxe}}(s_{\mathrm{w.f.min}}, Q, t_{\mathrm{f}}, r_{\mathrm{w}}, S) = T_{\mathrm{est}}(s_{\mathrm{w.f}} = s_{\mathrm{w.f.min}}, \dots)_{\mathrm{PCb}} \tag{4b}$$

On peut ainsi définir l'intervalle « TER » (de l'anglais "theoretical estimable range") au sein duquel la transmissivité réelle T^* devrait théoriquement être estimable pour une combinaison de paramètres d'essai de SC donnée (Équation 5a), soit : TER $\stackrel{\text{def}}{=} [T^*_{\mathrm{me}}, T^*_{\mathrm{mxe}}]$. De même, on peut définir l'intervalle à l'intérieur duquel $s_{\mathrm{w.f}}$ doit se trouver pour qu'une estimation de T(SC) soit potentiellement quantitativement fiable (Équation 5b). Puisque T^* est inconnue a priori, c'est l'intervalle en termes de rabattement qui doit être utilisé en contexte pratique.

$$T^*_{\mathrm{me}}(\dots) < T^* \leq T^*_{\mathrm{mxe}}(\dots) \tag{5a}$$

$$s_{\mathrm{w.f.min}} \leq s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.a}} - \Delta \tag{5b}$$

Ainsi, seuls les essais de SC dont le rabattement final $s_{\mathrm{w.f}}$ respecte la condition formulée par l'Équation 5b sont considérés « potentiellement quantitativement fiables ». Dans les autres cas, une information qualitative peut tout de même être extraite et exploitée. En effet, dans le cas où $s_{\mathrm{w.f}} > s_{\mathrm{w.a}} - \Delta$, on déduira qu'il est très probable que $T^* < T^*_{\mathrm{me}}$ tandis que, dans le cas opposé où $s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.f.min}}$, on déduira plutôt qu'il est très probable que $T^* > T^*_{\mathrm{mxe}}$.

e. Détermination de l'intervalle de fiabilité quantitative ("QRR")

La seconde opération de vérification consiste à déterminer, pour chaque essai de SC, l'intervalle de fiabilité quantitative « QRR » (de l'anglais "quantitatively reliable range"), en partant du principe qu'aucun des paramètres des essais de SC ne peut être mesuré parfaitement en contexte pratique.

Une méthodologie opérationnelle a donc été conçue afin d'estimer ce QRR, un essai à la fois. L'analyse d'incertitude implique une approche par simulation Monte Carlo dans un cadre synthétique. Le principe gouvernant cette approche est de comparer des estimations de T issues de l'inversion de données d'essai brouillées par l'ajout d'erreurs aléatoires d'amplitude réaliste aux valeurs exactes de T^* dont les données d'essai non bruitées sont issues. Pour des raisons de commodité, cette analyse est effectuée en considérant le logarithme de T plutôt que T. En amont de la simulation Monte Carlo, des amplitudes d'erreur typiques sont définies (sur une base documentée ou sinon arbitraire) pour chaque paramètre de l'essai : la notion statistique d'écart-type est bien adaptée à cette fin. De même, la combinaison de paramètres d'essai à tester (Q^*, t_f^*, r_w^*, S^*) doit être choisie.

Les étapes principales de la simulation Monte Carlo sont les suivantes :

1. Tout d'abord, une table de données fictive de grande taille doit être construite (p. ex. N = 5000). Un premier champ de la table est préparé en générant N valeurs « originales » de $\log T^*$ couvrant une vaste gamme de valeurs (allant par exemple de -10.0 jusqu'à -2.0).
2. Parallèlement, quatre autres champs de la table sont préparés en répétant N fois la même combinaison de paramètres d'essai (Q^*, t_f^*, r_w^*, S^*) choisie plus tôt.
3. Un rabattement final exact est calculé via $s_\mathrm{w.f}^* = s_\mathrm{w.f}(T^*, Q^*, t_\mathrm{f}^*, r_\mathrm{w}^*, S^*)_\mathrm{PCb}$ pour chacun des essais fictifs. Le jeu de données de SC « original » est alors complété.
4. Puis, un jeu de données de SC « bruité » est préparé par ajout d'erreurs aléatoires à une copie du jeu de données de SC « original », et donc à chacun des paramètres et résultats d'essai (Q^*, $s_\mathrm{w.f}^*$, t_f^*, r_w^*, S^*). Ces erreurs sont générées suivant une loi normale ou log-normale centrée dont l'écart-type est adapté pour chaque paramètre d'essai en fonction des amplitudes d'erreur définies plus loin (voir Tableau 1 en Section 3.2.1).
5. Enfin, la méthode d'estimation désirée, soit conventionnelle (Theis) ou nouvelle (PC), est appliquée à tout le jeu de données de SC « bruité », ligne par ligne, afin d'en obtenir une série de N valeurs de $\log T$ « estimées » (ipso facto incertaines puisque affectées par les erreurs présentes dans les données de SC « bruitées » qui sont exploitées).

Une fois la simulation Monte Carlo complétée, on dispose donc d'une longue série de N valeurs de $\log T$ « estimées », que l'on peut comparer à la série de $\log T^*$ « originales ». Partant de ces données générées, il ne reste plus qu'à évaluer le QRR mentionné plus tôt, c.-à-d. l'intervalle de $\log T$ — noter l'échelle logarithme utilisée — à l'intérieur duquel les valeurs estimées sont suffisamment proches des valeurs originales ($1/5 < T/T^* < 5/1$) dans la grande majorité des cas. Un exemple d'interprétation des séries liées de $\log T$ et $\log T^*$ est présenté plus loin (voir Section 3.2.1). C'est d'ailleurs en investiguant les résultats de telles analyses d'incertitude qu'une méthode d'interprétation qualitative relative au QRR a pu être proposée. Celle-ci suggère de faire les déductions qui suivent dans les cas où $\log T$ se situe en dehors de l'intervalle $\mathrm{QRR} \stackrel{\text{def}}{=} [\mathrm{QRR}_{\mathrm{inf}}, \mathrm{QRR}_{\mathrm{sup}}]$, où $\mathrm{QRR}_{\mathrm{inf}}$ et $\mathrm{QRR}_{\mathrm{sup}}$ sont les bornes dudit intervalle (en $\log T$). Ainsi, dans les cas où $\log T < \mathrm{QRR}_{\mathrm{inf}}$, on déduira qu'il est probable que $\log T^* < \mathrm{QRR}_{\mathrm{inf}}$, tandis que dans les cas opposés où $\log T > \mathrm{QRR}_{\mathrm{sup}}$, on déduira plutôt qu'il est probable que $\log T^* > \mathrm{QRR}_{\mathrm{sup}}$.

f. Recommandations pour l'application des concepts à un jeu de données réel

La nouvelle approche d'exploitation des données de T(SC) développée dans cette thèse ajoute, aux estimations de T(SC) obtenues via la méthode d'estimation basée sur PC, des indications relatives à la fiabilité desdites estimations. Ces indications de fiabilité découlent des aspects méthodologiques décrits dans les sous-sections précédentes. Appliquée à un jeu de données réel et donc nécessairement inexact, la nouvelle approche consiste essentiellement en la détermination supplémentaire des informations suivantes, itérativement pour chaque essai (ligne) du jeu de données :

- L'estimation de T(SC) n'est qualifiée de « très probablement quantitativement fiable » que dans le cas précis où $\mathrm{QRR}_{\mathrm{inf}} < \log T < \mathrm{QRR}_{\mathrm{sup}}$ tandis que la valeur déclarée de $s_{\mathrm{w.f}}$ respecte en même temps la condition $s_{\mathrm{w.f.min}} \leq s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.a}}$.
- Autrement, une information qualitative est déterminée par l'application combinée des interprétations qualitatives liées aux concepts de TER et QRR décrits précédemment.

Un exemple de résultat de l'application de la nouvelle approche d'estimation de T(SC) au jeu de données réel de la région d'étude (la Montérégie Est) est présenté plus loin, en Section 3.2.2.

3.1.2 Estimation de $K_b(z)$ à partir d'un jeu de données de T(SC)

Dans un second temps, une méthodologie originale a été développée afin de pouvoir évaluer statistiquement la variabilité verticale de la conductivité hydraulique équivalente, $K_b(z)$, d'un système aquifère rocheux fracturé régional, à travers une nouvelle approche d'exploitation de jeux de données d'estimations de T(SC). Les sous-sections qui suivent en résument les aspects principaux. Le détail de ces développements méthodologiques est présenté dans le Chapitre 7.

a. Approche générale de résolution du problème

Pour permettre la caractérisation de $K_b(z)$ à partir de données d'essais de SC tout en s'assurant que les erreurs de mesure dans les données d'essais de SC ainsi que le biais d'échantillonnage par les puisatiers ne conduisent pas à des interprétations erronées, une approche d'estimation de $K_b(z)$ en trois grandes étapes a été développée. Sa fonctionnalité ainsi que sa pertinence ont ensuite été vérifiées via son application à la région d'étude.

1) Premièrement, le problème a été investigué d'un point de vue conceptuel, ce qui a permis d'en dégager les deux volets clés : l'hétérogénéité naturelle du milieu fracturé, d'une part, et les pratiques de forage, d'autre part. Les concepts associés à chacun de ces volets ont ensuite été formalisés.

2) Deuxièmement, une méthode de résolution du problème basée sur une approche par simulation Monte Carlo a été développée. Un modèle stochastique simulant les deux volets identifiés à l'étape précédente (milieu fracturé hétérogène et pratiques de forage) a été conçu à cet effet.

3) Troisièmement, un flux de travail (*workflow*) a été élaboré de sorte que la méthodologie développée soit « opérationnelle », c.-à-d. facile à appliquer à un problème réel en contexte pratique.

Les sous-sections qui suivent résument le modèle stochastique puis le flux de travail proposés pour appliquer la nouvelle approche d'estimation de $K_b(z)$ à un jeu de données de T(SC) réel.

b. Description du modèle stochastique

Le modèle stochastique conçu pour cette thèse permet de reproduire les deux composantes complexes du problème, à savoir l'hétérogénéité naturelle du milieu fracturé d'une part, et les pratiques courantes des puisatiers — celles-là même qui sont à l'origine du biais important dans les données de T(SC) et dans les inférences statistiques conventionnelles sur la $K_b(z)$ de systèmes aquifères rocheux réels — d'autre part. Pour y arriver, le modèle stochastique comporte deux sous-modèles séquentiels : un premier consacré à la simulation de colonnes d'aquifère fracturé et un second consacré à la simulation d'opérations de forage (à travers les colonnes générées juste avant) imitant les pratiques courantes des puisatiers. De façon à concrétiser la nature stochastique de la modélisation, les paramètres des deux sous-modèles sont systématiquement générés « aléatoirement » via l'adjonction d'un terme d'hétérogénéité (défini avec une variable aléatoire) au terme approprié du modèle de référence. Une itération de simulation Monte Carlo par ce modèle correspond donc à la génération d'une colonne d'aquifère fracturé suivie immédiatement par la simulation du forage d'un puits fictif à travers ladite colonne (jusqu'à une profondeur décidée par le second sous-modèle).

Sous-modèle pour la génération d'aquifères fracturés :

Le premier sous-modèle sert à la simulation de colonnes d'aquifère fracturé. Par définition, ces colonnes sont unidimensionnelles, c.-à-d. définies seulement le long de l'axe vertical. Une colonne d'aquifère fracturé simulée consiste en une matrice rocheuse de conductivité hydraulique uniforme (notée K_m) percée en plusieurs endroits par des fractures. L'opération de simulation d'une colonne se résume à la génération des fractures, puis à l'assignation de propriétés hydrauliques à celles-ci. La génération des fractures exploite un modèle de référence décrivant la décroissance de la densité de fractures (fd^*) avec la profondeur dans le roc (z). De la même manière, l'assignation d'une ouverture hydraulique (b_f) à chaque fracture exploite aussi un modèle de référence décrivant une décroissance de $b_\mathrm{f}^*(z)$. Les b_f sont ensuite transformées en transmissivités de fracture (T_f) via l'utilisation de la loi cubique (Witherspoon *et al.*, 1980). Enfin, la K_b de la colonne d'aquifère fracturé est calculée à partir des données de T_f et de profondeur des fractures (z_f), par intervalle de profondeur régulier Δz, avec :

$$K_\mathrm{b}^i = \frac{K_\mathrm{m}\Delta z + \sum_{j=1}^{n_\mathrm{f}^i} T_\mathrm{f}^j}{\Delta z} \tag{6}$$

où i et j sont respectivement l'indice de l'intervalle de profondeur et l'indice de la fracture

individuelle parmi celles de l'intervalle en cours (i). C'est donc ce sous-modèle, produisant les données synthétiques de K_b par intervalles de profondeur et par couple colonne-puits, qui permettra de faire les inférences statistiques souhaitées sur la $K_b(z)$ du système aquifère rocheux réel, une fois l'ensemble du modèle stochastique calé (voir Section 3.1.2.c).

Sous-modèle pour la simulation d'opérations de forage :

Le second sous-modèle intervient suite au premier et simule le forage d'un puits ouvert dans la colonne d'aquifère fracturé préalablement simulée. Deux modes de forage sont définis : un mode « non biaisé » et un « biaisé ». Dans le mode non biaisé, la profondeur du puits dans le roc, d_w, est déterminée de manière purement aléatoire et donc totalement indépendante des caractéristiques hydrauliques de la colonne d'aquifère fracturé. Le mode biaisé quant à lui cherche à reproduire les pratiques courantes des puisatiers. Ainsi, dans le mode biaisé, la profondeur forée (d_dh) et la transmissivité croissante de l'intervalle foré (T^*_dh) sont surveillées en continu tout au long du processus de forage. Le puisatier virtuel s'assure d'abord que le trou foré ait au moins une certaine profondeur minimale : $d_\mathrm{dh} \geq d_\mathrm{w.min}$. Puis, il poursuit le forage jusqu'à ce que l'une ou l'autre des deux conditions d'arrêt suivantes soit remplie. Ou bien la transmissivité ciblée est atteinte : $T^*_\mathrm{dh} > T^*_\mathrm{w.target}(d_\mathrm{dh})$; ou alors, la profondeur forée (dans le roc) atteint une profondeur maximale (seuil) d'abandon prédéfinie : $d_\mathrm{dh} = d_\mathrm{w.max}$. Aussitôt que le forage est arrêté, la profondeur du puits est fixée définitivement via : $d_\mathrm{w} = d_\mathrm{dh}$. De ce fait, la transmissivité du puits est aussitôt établie, soit $T^*_\mathrm{w} = T^*_\mathrm{dh}$. L'opération de forage est ainsi achevée. Les données sortantes de ce sous-modèle sont tout simplement : T^*_w et d_w. L'astérisque de T^*_w signifie que la valeur est exacte (à l'intérieur du processus de simulation) et non estimée.

Résumé schématique du modèle stochastique :

La Figure 6 ci-dessous illustre de façon schématisée le fonctionnement du modèle stochastique. Sept sites de forage fictifs y sont représentés (w0 à w6), dont un cas extrême de roc non fracturé (w0). Dans la Figure 6a, chaque rectangle rouge représente une colonne d'aquifère fracturé simulée par le premier sous-modèle. Les fractures y sont représentées par des traits rouges dont l'épaisseur indique l'ampleur de l'ouverture (b_f) et donc de la transmissivité (T_f). Le rectangle blanc au milieu de chaque colonne illustre l'intervalle ouvert au roc de chaque puits. Dans la Figure 6b, les segments subverticaux des profils en lignes brisées dénotent des intervalles sans fractures, où seule la matrice contribue à la croissance de la T^*_dh, tandis que les segments subhorizontaux révèlent la contribution nettement plus importante des fractures dans la T^*_dh. Les points marquent

les coordonnées (T^*_{w}, d_{w}) des puits une fois achevés. La courbe verte représente la transmissivité ciblée ($T^*_{\mathrm{w.target}}$) selon le rabattement disponible ($s_{\mathrm{w.a}}$) ou la profondeur forée (d_{dh}), tandis que les lignes horizontales verte puis rouge représentent respectivement les critères de profondeurs minimale ($d_{\mathrm{w.min}}$) et maximale ($d_{\mathrm{w.min}}$) que le puisatier cherche à respecter.

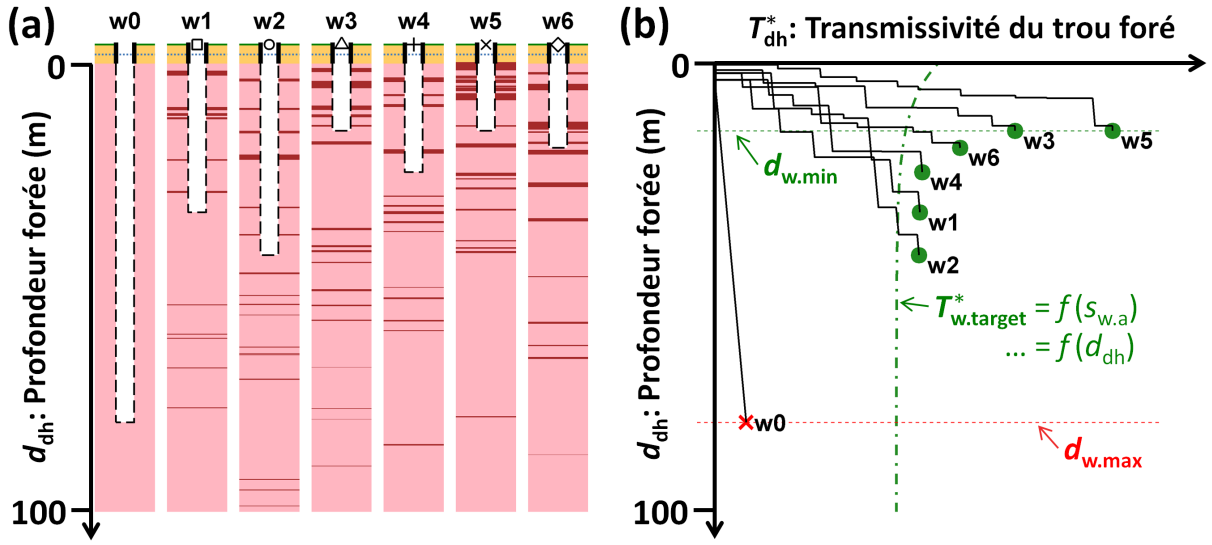


Figure 6 : Représentation schématique du fonctionnement du modèle stochastique. (a) Fractures et matrice rocheuse en partie atteintes par l'intervalle ouvert de sept puits fictifs (w0 à w6). (b) Profils verticaux de la transmissivité du trou foré (T^*_{dh}) pendant le forage de chacun des sept puits fictifs. Les critères d'arrêt du forage modélisant les pratiques des puisatiers sont illustrés.

La Figure 6a montre d'abord la disposition irrégulière des fractures dans chaque colonne d'aquifère fracturé générée par le premier sous-modèle, et les ouvertures variables de celles-ci, reflétant la forte hétérogénéité du milieu fracturé simulé. Elle illustre également les puits forés dans chaque colonne. On observe déjà, dans la Figure 6a, que les puits les moins profonds paraissent dans l'ensemble avoir rencontré davantage de fractures transmissives que les plus profonds. C'est toutefois la Figure 6b qui révèle véritablement le processus décisionnel suivi par les puisatiers virtuels. La Figure 6b illustre l'évolution de la T^*_{dh} durant l'opération de forage, mais surtout, elle met en lumière le contrôle majeur qu'ont les pratiques des puisatiers — telles que simulées par le second sous-modèle — sur les valeurs de d_{w} et de T_{w} obtenues. En particulier, on y perçoit la grande influence du critère relatif à la productivité du trou foré — selon lequel l'opération de forage n'est arrêtée que lorsque $T^*_{\mathrm{dh}} > T^*_{\mathrm{w.target}}(d_{\mathrm{dh}})$. En outre, la Figure 6 globale met en évidence l'aptitude du second sous-modèle (en mode biaisé) à reproduire les symptômes

principaux du biais d'échantillonnage par les puisatiers, à savoir : i) une distribution non uniforme des d_{w} au sein du domaine de profondeur (ici 0 – 100 m), et ii) une forte corrélation négative entre T_{w} et d_{w}. En somme, la Figure 6 fait voir que le modèle stochastique conçu dans cette thèse permet de générer un jeu de données de T_{w}, d_{w} biaisé, tout en réservant en parallèle les données de K_{b} qui seront nécessaires à l'estimation ultime de la $K_b(z)$.

c. Principes généraux d'application pratique de la méthode

L'application de la méthode opérationnelle développée dans cette thèse à un jeu de données réel afin d'estimer la $K_b(z)$ se résume au flux de travail suivant (ici en version abrégée) :

1) Collecte des données d'entrée requises.

Deux types de données sont requis : d'abord les estimations de $T_{\mathrm{w}}(\mathrm{SC})$ qui seront, dans l'idéal, obtenues via la nouvelle approche décrite précédemment (voir Section 3.1.1), puis, tout aussi importantes, les profondeurs des puits testés (d_{w}) dans le système aquifère rocheux régional.

2) Préparation des objectifs de calage.

D'une part, la variabilité verticale des données de T_{w} est résumée sous forme d'un choix de quantiles statistiques calculés par intervalle de profondeur. La fiabilité inégale des estimations de $T_{\mathrm{w}}(\mathrm{SC})$ est prise en compte à ce moment précis. Seuls les percentiles de T_{w} qui sont quantitativement fiables sont retenus comme objectifs de calage. D'autre part, la proportion de puits terminés dans chaque intervalle de profondeur est calculée, puis retenue comme objectif d'ajustement additionnel.

3) Paramétrage initial du modèle stochastique.

Le logiciel conçu par les auteurs de la méthode, qui concrétise le modèle stochastique sous la forme d'un ensemble de codes sources libres en langage R (R Core Team, 2017) (voir Annexe A7.7), est adapté aux besoins de l'étude, paramétré au mieux des connaissances disponibles (en assignant d'abord des valeurs a priori aux paramètres), puis exécuté une première fois.

4) Optimisation du modèle.

La qualité d'ajustement du modèle en termes de transmissivités (entre les quantiles des T_w^* simulées et les quantiles des T_w « observées ») et de distribution verticale des puits (entre les profils verticaux de densité de puits simulés et « observés ») est appréciée visuellement. Si elle est insatisfaisante, les paramètres du modèle sont modifiés manuellement, puis une itération supplémentaire d'exécution du modèle stochastique est effectuée (en répétant la présente étape 4). Lorsqu'enfin la qualité d'ajustement du modèle est satisfaisante, les paramètres et résultats du modèle désormais considéré « calé » sont conservés en mémoire, et l'étape se termine.

5) Exploitation des résultats du modèle calé.

Les résultats du modèle sont analysés de diverses façons. Il est alors supposé que les statistiques calculées à partir des données simulées (décrivant le milieu hétérogène) sont raisonnablement représentatives du système aquifère rocheux fracturé réel. Les statistiques d'intérêt prioritaire sont tout naturellement celles servant à décrire la variabilité de $\log K_b$ par intervalle de profondeur, puisqu'elles permettent de répondre à l'objectif premier de l'exercice de caractérisation hydraulique du système.

3.2 Résultats clés et discussion

L'application de la méthodologie développée au jeu de données de SC de la Montérégie Est a permis d'obtenir les résultats clés suivants.

3.2.1 Analyses d'incertitude des deux méthodes d'estimation de T(SC)

Tout d'abord, une analyse d'incertitude a été réalisée pour chacune des deux méthodes d'estimation de T(SC) décrites dans cette étude, à savoir la méthode conventionnelle basée sur la solution de Theis, d'une part, et la nouvelle méthode basée sur la solution de Papadopulos-Cooper (PC), d'autre part. Les paramètres d'essai considérés comme valeurs de référence ainsi que les amplitudes d'erreur considérées pour les fins de cet exercice sont donnés dans le Tableau 1 ci-dessous. La Figure 7, également en page suivante, montre côte à côte les résultats des deux analyses d'incertitude.

Tableau 1 : Valeur de référence et échelle d'erreur considérées pour chacun des paramètres d'essai dans les analyses d'incertitude

Paramètre	Valeur de référence	Amplitude d'erreur
Q^* : débit de pompage	22.7 L/min (6 US gpm)	0.6 US gpm
t_f^* : durée du pompage	60 min (1 h)	10 min
r_w^* : rayon du puits	0.0762 m (3 po)	0.5 po
S^* : emmagasinement local de l'aquifère	5×10^{-3} [-] (semi-captif)	1/10 à 10/1 (en échelle log.)

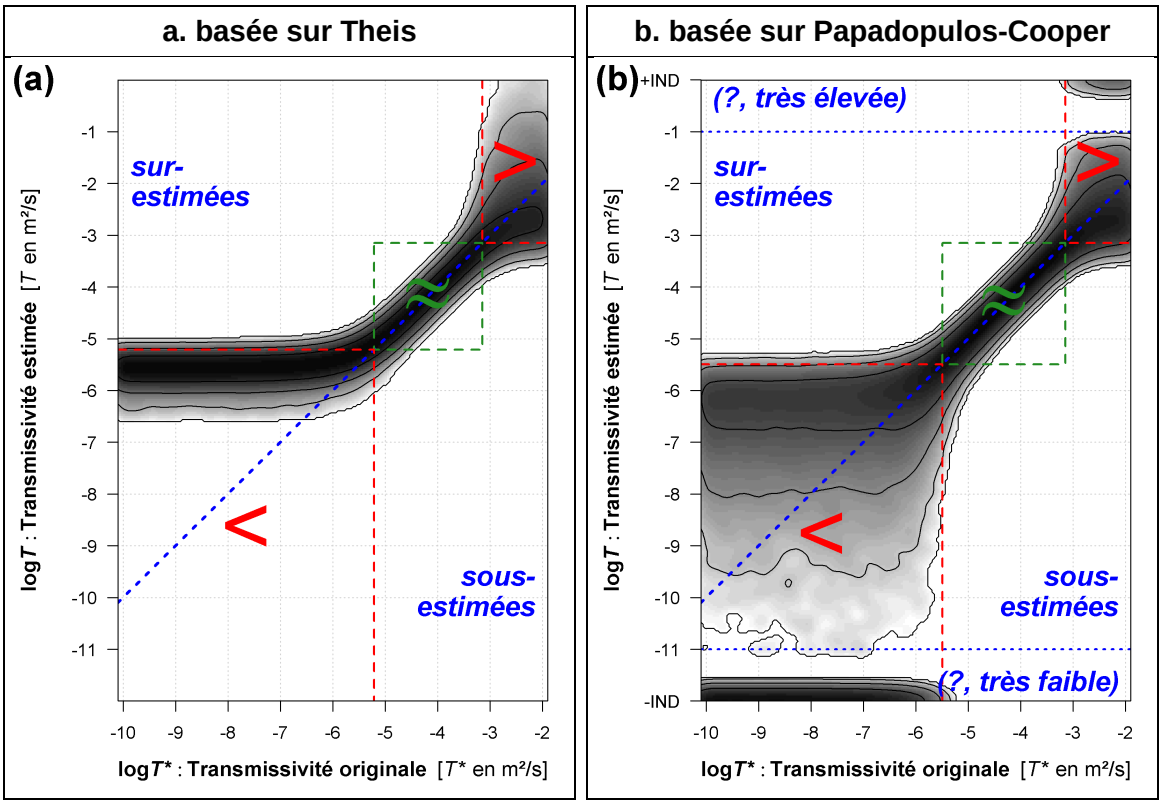


Figure 7 : Résultats de l'analyse d'incertitude pour deux méthodes d'estimation de T(SC), selon les paramètres et grandeurs d'erreur inscrits au Tableau 1, illustrés sous la forme d'estimations 2D de noyau de densité (2D KDE). (a) Méthode basée sur la solution de Theis ; (b) Méthode basée sur la solution de Papadopulos-Cooper.

Dans la Figure 7 ci-dessus, le cadre gauche (a) présente les résultats d'une application de la solution inverse de Theis et le droit (b), les résultats obtenus avec la solution inverse de Papadopulos-Cooper. Les cas d'estimation indéterminés (±IND) sont indiqués en rapportant leur coordonnée Y aux extrémités du graphe (-IND → -12.0; +IND → 0.0). La ligne bleue pointillée

représente ce que seraient des estimations parfaites ($T = T^*$) et sépare le graphe en deux parts, l'une de surestimation ($T > T^*$), l'autre de sous-estimation ($T < T^*$). Les bornes QRR calculées permettent de diviser l'aire graphique en 9 zones, dont seules les trois principales sont soulignées : la zone centrale ('≈'), délimitée par un contour pointillé vert et figurant le QRR, et les zones inférieure ('<') et supérieure ('>') par rapport au QRR, chacune circonscrite par un rectangle pointillé rouge.

La Figure 7 montre que, quelle que soit la méthode d'estimation utilisée, les estimations de transmissivité ($\log T$) ne demeurent proches de leur transmissivité originale correspondante ($\log T^*$) qu'à l'intérieur de l'intervalle de fiabilité quantitative (QRR) défini précédemment (en Section 3.1.1) et identifié visuellement ici par la zone '≈'. En dehors du QRR (zones '<' ou '>'), les surestimations ou sous-estimations deviennent trop fréquentes. Les QRR évalués sont de [-5.21, -3.15] pour la méthode basée sur Theis, contre [-5.49, -3.15] pour la méthode basée sur PC. La nouvelle méthode basée sur PC est donc quelque peu plus performante en termes d'estimation de valeurs modérément faibles de $\log T^*$. En-deçà du QRR, la méthode basée sur Theis montre un biais de surestimation systématique (et de plus en plus prononcé) lorsque les valeurs de $\log T^*$ originales sont faibles : les $\log T$ estimées se concentrent alors autour d'un mode unique élevé, plafonnant à environ -5.5 (Figure 7a). Différemment, la méthode d'estimation basée sur PC produit tout à la fois des $\log T$ estimées inférieures et supérieures aux valeurs de $\log T^*$ qu'elles tentent d'estimer (Figure 7b). La Figure 7 met ainsi en évidence la sensibilité très différente des deux méthodes d'estimation aux erreurs affectant les données de SC exploitées. Néanmoins, jusqu'ici, les deux méthodes d'estimation paraissent plutôt équivalentes en termes de fiabilité, en particulier en termes de QRR.

Or, c'est la Figure 7b qui vient mettre en lumière le principal avantage offert par la nouvelle méthode d'estimation de T(SC) qui est proposée dans cette thèse. En effet, tandis que la méthode conventionnelle produit des valeurs fortement surestimées mais en apparence plausibles lorsque la $\log T^*$ est faible, la nouvelle méthode produit fréquemment des valeurs dites « indéterminées » (-IND). Ces cas où $\log T$ = -IND indiquent en fait des combinaisons de paramètres d'essais (avec erreurs) incohérentes, pour lesquelles le rabattement final déclaré ($s_{\mathrm{w.f}}$) excède le rabattement maximal théoriquement possible ($s_{\mathrm{w.max}}$) lié aux paramètres d'essai. La capacité de la nouvelle méthode d'estimation de T(SC) à détecter ce type d'incohérence ($s_{\mathrm{w.f}} > s_{\mathrm{w.max}}$) dans les données d'entrée constitue un avantage significatif par rapport à la méthode conventionnelle parce qu'elle évite ainsi de nombreuses mauvaises interprétations.

En vue d'évaluer l'efficacité d'un éventuel schéma de classification découlant des trois zones de similitude ('<', '≈', '>') illustrées à la Figure 7, une matrice de confusion a été calculée pour chacune des deux méthodes d'estimation à partir des données couplées de $\log T^*$ et de $\log T$ produites par celles-ci. Ces matrices de confusion indiquent la proportion des essais analysés se classant dans chacune des trois zones tant en termes de la transmissivité estimée ($\log T$, en Y) que de la transmissivité originale ($\log T^*$, en X), d'où sa forme 3×3. Ces matrices de confusion sont présentées dans le Tableau 2 ci-dessous.

Les matrices de confusion confirment l'efficience d'un tel schéma de classification. En effet, les zones coïncidentes (cellules en vert dans le Tableau 2) montrent toutes des taux de concordance très élevés de plus de 90 %. Ce résultat clé met en évidence que le schéma de classification en trois classes de similitude qualitative ('<' ou '≈' ou '>') fonctionne très bien non seulement pour la classe centrale correspondant à la zone du QRR ('≈') mais aussi de part et d'autre de celle-ci ('<', '>'). Cela signifie qu'une valeur estimée $\log T$ située dans la zone '<' peut être interprétée en tant qu'information qualitative comme quoi la valeur inconnue $\log T^*$ est très probablement « inférieure à la borne inférieure du QRR », alors qu'une valeur estimée $\log T$ située dans la zone '>' peut être interprétée en tant qu'information qualitative comme quoi la valeur inconnue $\log T^*$ est très probablement « supérieure à la borne supérieure du QRR ».

Tableau 2 : Matrices de confusion décrivant la qualité du classement, en trois zones de similitude, des transmissivités estimées (*T*) par rapport aux transmissivités originales correspondantes (*T), pour chacune des deux méthodes d'estimation. Les cellules diagonales (en vert) mettent en évidence les pourcentages très élevés de bons classements.**

a. basée sur Theis			
	Proportion par zone de T^* (%)		
Zone de T	'<'	'≈'	'>'
'>'	0.00	7.37	92.63
'≈'	6.03	90.18	3.79
'<'	99.31	0.69	0.00

b. basée sur Papadopulos-Cooper			
	Proportion par zone de T^* (%)		
Zone de T	'<'	'≈'	'>'
'>'	0.00	7.29	92.71
'≈'	3.40	92.77	3.83
'<'	98.26	1.74	0.00

Ayant ainsi été validé, le schéma de classification a dès lors pu être utilisé pour l'application de la nouvelle approche d'estimation de T(SC) à l'ensemble du jeu de données de SC de la région d'étude.

3.2.2 Estimations de T(SC) obtenues pour la région d'étude en tenant compte de leur fiabilité limitée

La nouvelle approche d'estimation de T(SC) développée dans cette thèse a été appliquée au jeu de données d'essais de capacité spécifique (SC) disponibles pour la région d'étude. Un filtrage de base a été effectué, ce qui a réduit le volume du jeu de données, qui est passé de quelque 33 000 à 18 313 essais de SC réalisés dans le système aquifère rocheux régional, soit une coupe d'environ 45 %. Ce filtrage de base était, en fait, indispensable puisque les deux méthodes analytiques d'estimation de T(SC) exigent une valeur (non vide) pour tous les paramètres d'essai. Désormais à partir du jeu de données filtré, les estimations de $\log T$ brutes ont été calculées pour tous les essais, utilisant en parallèle les deux méthodes d'estimation — basée sur Theis ou basée sur Papadopulos-Cooper (PC) — en vue d'en comparer les résultats et performances en contexte appliqué. Les $\log T$ estimées ont ensuite été interprétées selon le schéma de classification recommandé par l'approche, lequel comprend 8 classes de fiabilité. Ces 8 classes de fiabilité sont issues du croisement entre les 2 classes principales liées au TER (voir Section 3.1.1.d) et les 4 classes liées au QRR. Une classe supplémentaire liée au QRR a dû être considérée en plus afin de gérer les rares cas où le QRR est nul. La définition précise du schéma de classification utilisé ainsi que le décompte des estimations par classe de fiabilité et par méthode d'estimation sont présentés dans le Tableau 3 ci-après.

Les prédictions en termes de $\log T^*$ réelle produites par la nouvelle approche sont présentées conjointement aux estimations directes produites par l'approche conventionnelle (Figure 8). Les prédictions faites par la nouvelle approche (en suivant l'algorithme décrit à la Section 3.1.1.f) sont dites de nature mixte puisqu'elles sont tantôt quantitatives ($\log T^* \approx \log T$), tantôt qualitatives ($\log T^*$ < telle valeur, ou $\log T^*$ > telle valeur), d'où leur notation par la variable zonée $\log T^*_{(<|\approx|>)}$. Les deux graphiques du dessus ('a1', 'b1') représentent les seules estimations de T considérées directement utilisables selon la règle de chaque approche d'exploitation de T(SC). Le graphique 'a1' présente donc, en gris, toutes les estimations obtenues par l'approche conventionnelle, qui ne permet pas de discriminer les estimations selon leur fiabilité. Différemment, le graphique 'a2' ne présente, en vert, que les estimations passant le test de fiabilité (∈ QRR et ∈ TER) tel que décrit plus haut. Le graphique 'b2' informe sur les indications qualitatives rendues possibles grâce à l'application du schéma de classification décrit dans le Tableau 3, ici uniquement pour les estimations obtenues avec la méthode basée sur la solution de PC. Sept classes d'indication peuvent ainsi être identifiées dans la Figure 8.b2. Chaque indication qualitative y est placée à la limite inférieure ou supérieure de l'étendue possible de $\log T^*$, les marques '<' et '>' informant que

les valeurs $\log T^*$ recherchées sont en dessous ou au-dessus de la coordonnée X indiquée. La convention des couleurs appliquée pour tracer les points de la figure est expliquée au Tableau 3. Noter que, d'une part, le système de classement illustré dans la Figure 8b permet de discriminer les estimations entre « quantitativement fiables » (lorsque dans la zone QRR) ou « qualitativement informatives » (lorsque hors de cette zone), et que, d'autre part, aucune indication qualitative n'est représentée dans la Figure 8.a2 en raison de l'indisponibilité d'information de fiabilité pour les estimations obtenues par l'approche conventionnelle.

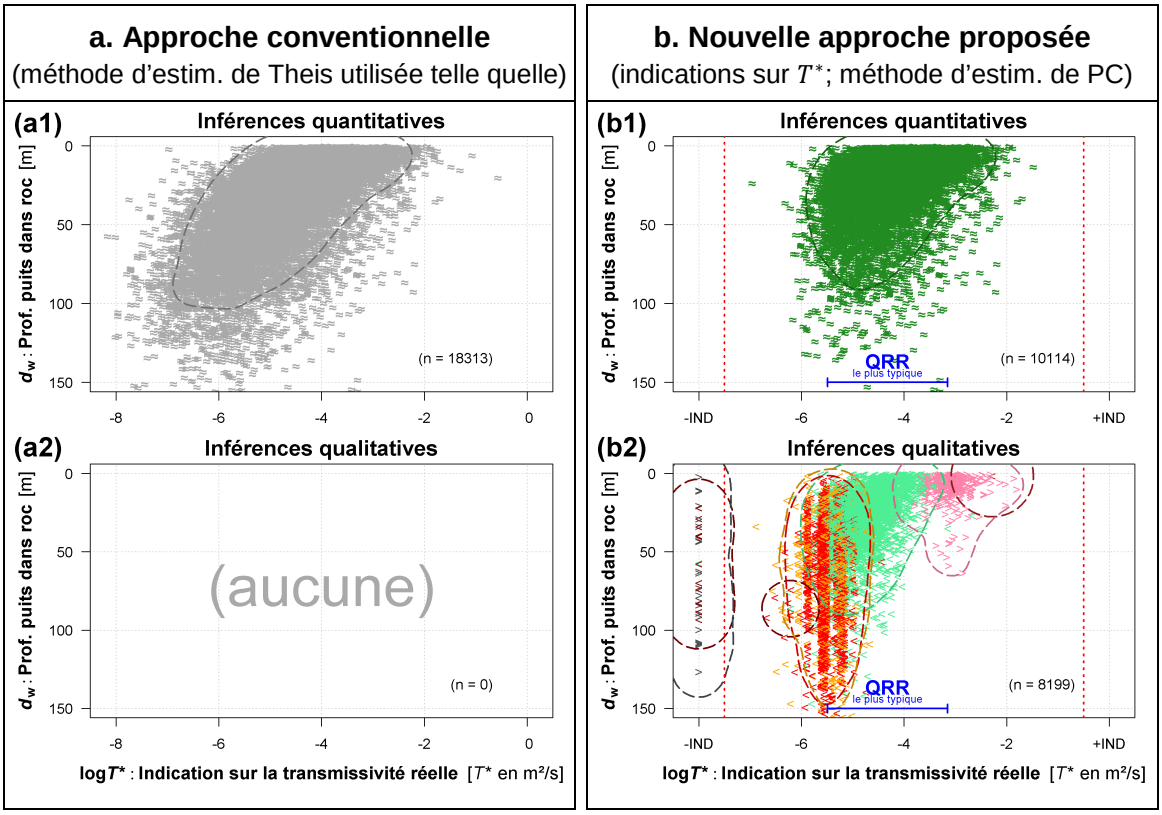


Figure 8 : Relation entre les valeurs de transmissivité zonées ($\log T^*_{(<|\approx|>)}$) en X et la profondeur du puits (d_w) en Y. Voir le texte précédant la figure, ainsi que le Tableau 3, pour plus d'informations.

Tout d'abord, le Tableau 3 comme la Figure 8b montrent qu'une part majoritaire (~55 %) des prédictions faites avec la nouvelle approche sont quantitativement fiables. Ceci met en lumière que l'intervalle pour lequel les $\log T$ estimées sont quantitativement fiables est nécessairement restreint en pratique, et ici d'à peine 2.5 ordres de grandeur. On constate ensuite, dans la Figure 8b, que ces prédictions quantitativement fiables (de type $\log T^*_{(\approx)}$) se concentrent majoritairement

au niveau du « QRR le plus typique », c'est-à-dire le QRR associé à la combinaison de paramètres d'essai la plus fréquente dans le jeu de données (voir Tableau 1 plus haut). Ce constat suggère qu'il pourrait peut-être s'avérer suffisant, en pratique, d'évaluer un seul QRR pour l'ensemble du jeu de données de SC exploité. De plus, on y constate que la grande majorité des prédictions qualitatives de type $\log T^*_{(<)}$ ou $\log T^*_{(>)}$ apparaissent en fait groupées autour des bornes inférieure ou supérieure du QRR le plus typique, vers -5.5 ou -3.0. Ce constat met en lumière que l'intervalle pour lequel les $\log T$ estimées sont quantitativement fiables est restreint en pratique, ici d'à peine 2.5 ordres de grandeur.

Tableau 3 : Système de classification des indications sur la transmissivité réelle (log *T) en huit classes de fiabilité de T(SC), utilisé dans la nouvelle approche d'exploitation de données de T(SC). Les deux dernières colonnes du tableau rapportent les fréquences obtenues pour chaque classe de fiabilité et chaque méthode d'estimation, lors de l'application à la région d'étude.**

# / Symbole / Couleur	Définition de la classe	Modèle prédictif associé	Total (Theis)	Total (PC)
1 / ▽ / ■	'< QRR' et '< TER'	$\log T^* < \max(\mathrm{QRR_{inf}}, \mathrm{TER_{inf}})$	3031 (17 %)	2763 (15 %)
2 / ▽ / ■	'< QRR' et '∈ TER'	$\log T^* < \mathrm{QRR_{inf}}$	1702 (9 %)	1508 (8 %)
3 / ○ / ■	'∈ QRR' et '< TER'	$\log T^* < \mathrm{TER_{inf}}$	3229 (18 %)	3517 (20 %)
4 / ○ / ■	'∈ QRR' et '∈ TER'	$\log T^* \approx \log T$	9900 (54 %)	10114 (55 %)
5 / △ / ■	'> QRR' et '< TER'	$\log T^* < \mathrm{TER_{inf}}$	1 (~0.005 %)	1 (~0.005 %)
6 / △ / ■	'> QRR' et '∈ TER'	$\log T^* > \mathrm{QRR_{sup}}$	372 (2 %)	373 (2 %)
7 / × / ■	'? (QRR=Ø)' et '< TER'	$\log T^* < \mathrm{TER_{inf}}$	35 (~0.2 %)	15 (~0.1 %)
8 / × / ■	'? (QRR=Ø)' et '∈ TER'	$\log T^* > \mathrm{TER_{inf}}$	43 (~0.2 %)	22 (~0.1 %)

Explications : QRR = intervalle de fiabilité quantitative ; TER = intervalle théoriquement estimable ; 'inf' et 'sup' indiquent les bornes inférieure et supérieure de l'intervalle ; T^* est la T réelle que l'on cherche à connaître.

Par ailleurs, il est intéressant de souligner qu'une part importante des prévisions de type $\log T^*_{(<)}$ sont en fait associées à des estimations indéterminées ($\log T$ = -IND) issues d'essais présentant une incohérence physique dans leurs paramètres. Cela met en évidence une autre caractéristique

avantageuse de la nouvelle approche. Celle-ci offre des prédictions qualitatives utiles et cohérentes même quand $\log T$ = -IND, grâce à la flexibilité des modèles prédictifs rattachés au schéma de classification utilisé (Tableau 3). Cette capacité étonnante de la nouvelle approche à valoriser les essais « incohérents » démontre en outre que ces derniers peuvent apporter des informations utiles sur la $\log T^*$ réelle même s'ils sont incohérents, et qu'ils ne devraient donc jamais être exclus du processus d'estimation — par exemple lors du filtrage.

Enfin, cet exercice d'application met en évidence la nature trompeuse de l'approche conventionnelle. En effet, en présentant les estimations de T comme si elles étaient toutes fiables, le nuage de points de la Figure 8.a1 donne la fausse impression que l'on dispose d'un jeu de données de T prêt à être exploité, par exemple pour des analyses statistiques par intervalle de profondeur. La raison principale pour laquelle l'approche conventionnelle est inférieure à la nouvelle approche n'est pas tant au niveau de sa capacité à estimer la T^* réelle avec précision (les QRR étant similaires pour les méthodes de Theis et de PC : revoir Figure 7) mais surtout en ce qu'elle ne reconnaît pas qu'une proportion significative des T estimées ne sont pas quantitativement fiables et donc ne doivent tout simplement pas être jointes avec les T estimées fiables. Par conséquent, l'approche conventionnelle produit en bout de ligne des statistiques renseignant sur la variabilité des données estimées ($\log T$), et non sur la variabilité réelle des transmissivités aux puits ($\log T^*$), soit la variable d'intérêt. C'est pourquoi la nouvelle approche, en fournissant des indications zonées sur les transmissivités réelles aux puits ($\log T^*_{(<|\approx|>)}$), serait à privilégier en tout temps.

3.2.3 Estimation de K_b(z) à partir des estimations de T(SC) obtenues pour la région d'étude

Après avoir constitué un jeu de données renseignant sur la transmissivité réelle ($\log T^*$) aux puits de la région (en Section 3.2.2), la nouvelle méthodologie développée pour l'estimation de la variabilité verticale de la conductivité hydraulique équivalente, K_b(z), a enfin pu être appliquée à la caractérisation hydraulique du système aquifère rocheux fracturé de la région.

Les aspects méthodologiques ayant déjà été présentés de façon relativement détaillée dans la Section 3.1.2, cette section se limite à la présentation succincte des résultats obtenus, une fois le modèle stochastique calé aux statistiques tronquées de $\log T^*$ « observées » pour un seul des contextes géologiques de la région, soit la Plate-forme du Saint-Laurent.

Dans un premier temps, on s'intéresse aux données décrivant les puits simulés et réels. La Figure 9 ci-dessous présente les données de puits (T_w^* : transmissivité locale au puits, et d_w : profondeur du puits dans le roc) simulées par le modèle stochastique calé pour le contexte géologique de la Plate-forme du Saint-Laurent, ainsi que les statistiques quantiles « simulées » associées, d'une part, et les statistiques quantiles « observées » pour ce contexte géologique, d'autre part. Ces dernières ont été calculées à partir du jeu de données de transmissivités zonées ($\log T^*_{(<|\approx|>)}$) préalablement obtenu, en appliquant la nouvelle approche d'inférence de T(SC) considérant la fiabilité limitée des estimations (voir Section 3.2.2). La classification des données de $\log T^*_{(<|\approx|>)}$ a cependant été réduite aux trois classes délimitées par les seules bornes d'un QRR global pour tout le jeu de données, suivant l'approche simplifiée décrite dans le Chapitre 7. Cette simplification des données de $\log T^*_{(<|\approx|>)}$ est requise parce qu'aucune méthode ou algorithme n'est à notre connaissance disponible à ce jour qui permette d'exploiter un tel mélange enchevêtré de valeurs et d'intervalles de valeurs.

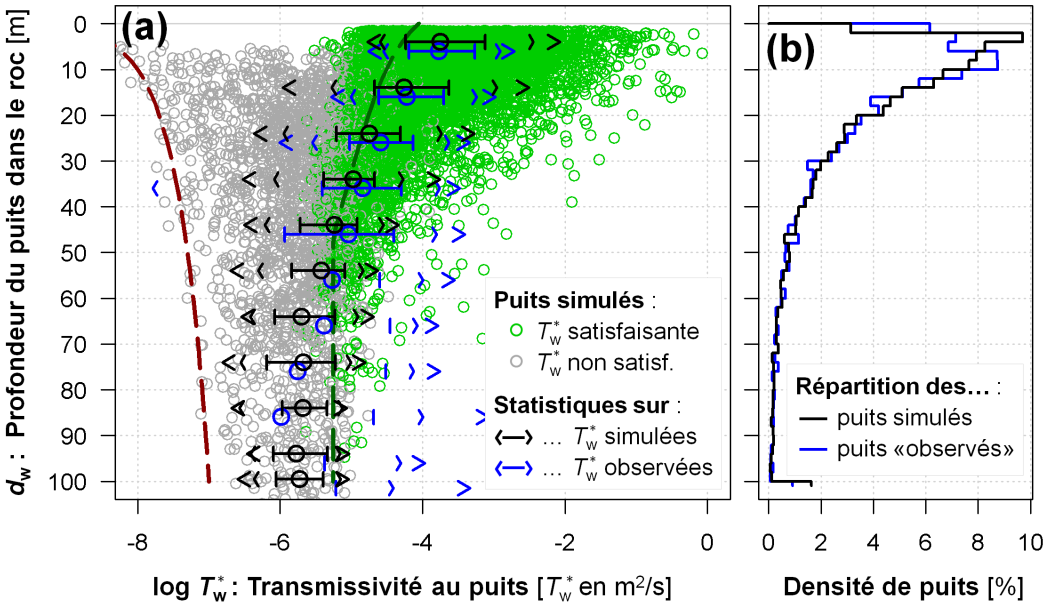


Figure 9 : Qualité du calage du modèle stochastique optimisé pour le contexte géologique de la Plate-forme du Saint-Laurent dans la région d'étude. (a) Transmissivité au puits, profondeur du puits dans le roc, et statistiques sur les transmissivités simulées et observées, par intervalle de profondeur ; (b) Profils décrivant la répartition verticale des puits dans le roc. Statistiques sur les résultats simulés en noir, et sur les données observées en bleu.

La Figure 9a montre les données simulées de transmissivité au puits ($\log T_w^*$) en fonction de sa profondeur (d_w). Les cercles verts dénotent les puits qui ont rencontré le critère de productivité

$T_{\mathrm{w}}^{*} > T_{\mathrm{w.target}}^{*}(s_{\mathrm{w.a}} \sim d_{\mathrm{w}})$, les gris, ceux qui ne l'ont pas rencontré ; la courbe vert foncé indique le modèle utilisé pour définir cette T_{w}^{*} ciblée en moyenne par les puisatiers ($T_{\mathrm{w.target}}^{*}$). Quant à la courbe rouge foncé, elle représente le modèle de référence pour une T_{w}^{*} qui ne serait associée qu'à la seule K de la matrice rocheuse (c.-à-d. en l'absence de fractures) et s'accroîtrait avec la profondeur forée dans le roc. Le graphique renseigne aussi, par intervalles de profondeur, sur la distribution de $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$, sous forme de percentiles. Ces percentiles, signalés en noir pour les données de simulation et en bleu pour les données observées, comprennent en particulier l'intervalle interquartiles, lequel est représenté par un segment de droite lorsqu'il est adéquatement borné. Pour de plus amples explications sur la représentation graphique des résultats, voir la légende exhaustive de la Figure 35, dans le Chapitre 7. La Figure 9b, disposée auprès de la précédente, montre la distribution des profondeurs de puits exprimée ici sous forme de pourcentages (%) calculés par intervalles réguliers de 2 m. Les puits excédant 100 m sont cumulés dans un même intervalle visible au bas du graphique. Comme dans la Figure 9a, le tracé noir réfère aux données simulées, et le bleu aux données observées.

La Figure 9 montre tout d'abord la bonne qualité du calage obtenu suite à l'ajustement manuel des paramètres du modèle stochastique, et ce tant en termes de statistiques (percentiles) sur $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ que de densité de puits par intervalle de profondeur. En fait, seule la dispersion des $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ « observées » dans les intervalles les plus profonds est mal reproduite par les puits simulés. La Figure 9a met néanmoins en lumière la capacité du modèle stochastique à produire des $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ très dispersées. En effet, les valeurs s'étendent sur près de 8 ordres de grandeur dans la simulation. À l'extrémité gauche de la Figure 9a, soit au voisinage de la courbe rouge foncé, on trouve les puits dans lesquels la transmissivité au puits résulte essentiellement de la faible K de la matrice rocheuse. À l'opposé, plus on s'approche de l'extrémité droite du graphique, plus les puits ont profité de fractures transmissives. En outre, la Figure 9 démontre, comme la Figure 6 mais désormais dans une situation appliquée, l'excellente capacité du modèle stochastique (en mode biaisé) à reproduire les symptômes principaux du biais d'échantillonnage par les puisatiers qui sont, rappelons-le : i) une distribution non uniforme des d_{w} au sein du domaine de profondeur (ici 0 – 100 m), et ii) une forte corrélation négative entre T_{w} et d_{w}.

Dans un second temps, la Figure 10 (en page suivante) présente, par intervalles de profondeur, les distributions statistiques des valeurs de K_{b} générées par le modèle stochastique calé pour le contexte géologique de la Plate-forme du Saint-Laurent.

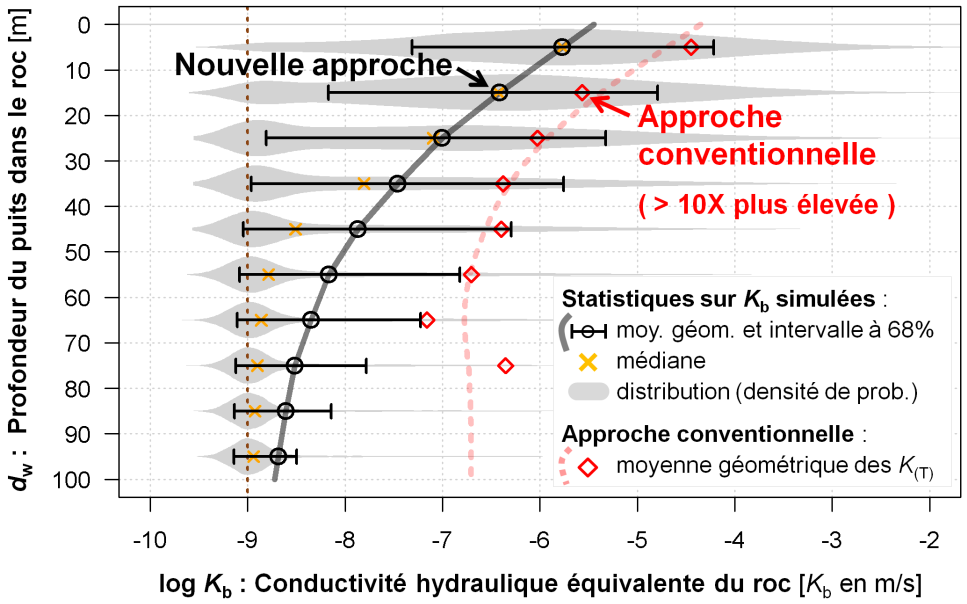


Figure 10 : Prédictions relatives à la variabilité verticale de la conductivité hydraulique équivalente (K_b) du système aquifère rocheux fracturé de la région d'étude, pour le contexte géologique de la Plate-forme du Saint-Laurent. Les statistiques sur $\log K_b$ sont évaluées séparément pour chaque intervalle de profondeur de 10 m. La densité empirique de distribution de $\log K_b$ est représentée par une surface grise allongée. La moyenne géométrique des K_b (cercle noir) est accompagnée de l'intervalle de variabilité basé sur les 16ème à 84ème percentiles (approximativement ±1 écart type). La médiane des K_b (croix orange) est également indiquée. L'épaisse courbe grise reliant les cercles noirs fait voir notre proposition de modèle optimal de profil vertical régionalement représentatif de $\log K_b(z)$. À ses côtés, les losanges rouges et le tracé rouge qui les relie approximativement illustrent le modèle comparatif que l'on obtiendrait comme solution pour $\log K_b(z)$ en appliquant l'approche conventionnelle au lieu de la nouvelle approche par simulation Monte Carlo proposée dans cette thèse. En outre, la ligne verticale brun foncé indique la conductivité hydraulique moyenne (de référence) considérée pour la matrice rocheuse ($\log K_m^* = -9$). Bien noter l'échelle logarithmique de l'axe des abscisses ($\log K_b$).

La Figure 10 révèle tout d'abord la grande hétérogénéité des K_b simulées. Cette variabilité, toutefois, varie de façon importante avec la profondeur. Les distributions se concentrent de plus en plus près d'un mode inférieur (~1×10^{-9} m/s) correspondant justement à la faible conductivité hydraulique de la matrice telle que paramétrée dans notre modèle. Il en va de même pour les médianes, qui tendent graduellement vers ce mode inférieur. Ces résultats rappellent ainsi que les K_b d'un milieu fracturé hétérogène sont nécessairement un mélange entre des valeurs élevées propres aux intervalles favorablement fracturés, et des valeurs très faibles associées aux intervalles sans fracture d'ouverture significative et alors contrôlés surtout par la matrice.

La courbe noire (et ses intervalles de variabilité) proposée comme réponse au problème à l'étude dans ce premier volet de la thèse, fournit finalement l'information que l'on cherchait, à savoir la tendance générale de $\log K_b(z)$ au sein du système aquifère fracturé de la région d'étude, ici pour

un de ses trois grands contextes géologiques. La tendance modélisée suggère que les K_b passent en moyenne d'environ 2×10^{-6} m/s à proximité du toit du roc à aussi peu de 2×10^{-9} m/s à une profondeur de 100 m dans le roc de ce contexte géologique (Plate-forme du Saint-Laurent), à l'échelle régionale. La courbe rouge, présentée à titre comparatif, révèle que l'approche conventionnelle est portée à surestimer considérablement la $\log K_b\,(z)$ à toutes les profondeurs, par rapport à la nouvelle approche.

En somme, les résultats présentés dans la Figure 10 témoignent du succès de l'application des approches originales développées dans le premier volet « hydraulique » de cette thèse à la caractérisation hydraulique de la variabilité verticale de la K_b du système aquifère rocheux fracturé de la région d'étude. La mise en œuvre séquentielle des méthodologies opérationnelles proposées permet, en effet, de relier de façon désormais plus rigoureuse la prédiction de K_b aux données utilisées tout en amont, soit les données d'essais de capacité spécifique. Parallèlement, ces travaux mettent en évidence les insuffisances et les failles conceptuelles inhérentes aux approches conventionnelles généralement utilisées pour répondre à la même question.

CHAPITRE 4 : ÉTUDE PALÉO-HYDROGÉOLOGIQUE

Le second volet de la thèse s'est intéressé à l'étude paléo-hydrogéologique de la dynamique transitoire du système aquifère régional de la Montérégie Est, du début de l'épisode d'incursion marine par la Mer de Champlain jusqu'à aujourd'hui. Les sections suivantes font ainsi une courte synthèse du Chapitre 8.

4.1 Méthodologie

L'approche suivie dans ce second volet de la thèse a reposé principalement sur la modélisation hydrogéologique numérique. Les modèles hydrogéologiques développés visant avant tout une amélioration de la compréhension générale des effets que peuvent avoir les transgressions-régressions marines de grande amplitude sur les systèmes aquifères régionaux, le degré de complexité intégré à ceux-ci fut intentionnellement limité, suivant le principe de parcimonie recommandé par Hill (2006). La mise en œuvre de modélisations simples permet effectivement de se concentrer sur l'étude des processus tout en maximisant la transparence des modèles numériques développés (Hill, 2006). Ce choix méthodologique de la simplicité des modèles a découlé aussi du fait que la disponibilité de données de validation s'avère très limitée en ce qui concerne la salinité actuelle et surtout la salinité passée des eaux souterraines au sein du système aquifère régional étudié, surtout dans le roc. Les modèles hydrogéologiques numériques ont tous été développés à partir d'un modèle conceptuel préparé préalablement et fondé sur la revue des paléoconditions ainsi que sur le contexte hydrogéologique actuel. Les travaux se sont ainsi déployés en trois phases.

Tout d'abord, un inventaire ciblé de la littérature a été réalisé afin de trouver les informations nécessaires à la conceptualisation du problème paléo-hydrogéologique investigué. D'une part, des données géographiques, géologiques, hydrogéologiques et hydrogéochimiques sur la région d'étude (ou sur d'autres régions en contextes similaires) ont été extraites puis mises à profit pour décrire la région d'étude, le système aquifère régional (comprenant à la fois le système aquifère rocheux fracturé régional et l'aquitard silto-argileux sus-jacent) et les conditions de surface dans leur état actuel. D'autre part, un exercice moins courant, mais tout aussi important pour les fins de la présente étude, a été fait pour dénicher, extraire, puis colliger les données diverses

nécessaires à la reconstitution de l'évolution des paléoconditions environnementales jadis imposées à la surface du système aquifère régional. L'ensemble de l'information ainsi réunie a été intégré dans un modèle conceptuel représentant à la fois le système aquifère régional à l'étude, l'évolution des paléoconditions environnementales dans la région depuis le début de l'incursion marine jusqu'à aujourd'hui, ainsi que les processus souterrains envisagés comme les plus déterminants dans l'évolution spatiotemporelle de la salinité des eaux souterraines à l'intérieur du système aquifère.

Ensuite, des modèles hydrogéologiques numériques unidimensionnels relativement simples ont été préparés dans le but précis d'étudier les rôles et l'importance relative de chacun des processus impliqués dans le transport souterrain de la salinité. Cette première série de modélisations numériques s'est concentrée sur l'étude de la mise en place puis du transport de la salinité au sein de l'aquitard argileux. Les processus ont été étudiés séparément dans la mesure du possible, puis progressivement combinés, c'est-à-dire couplés à l'intérieur d'un même modèle.

Enfin, un modèle hydrogéologique numérique (en coupe 2D verticale) jugé davantage représentatif du système aquifère régional réel a été développé afin de simuler l'évolution spatiotemporelle de l'état du système, tant en termes de charges hydrauliques et d'écoulements souterrains que de migration de la salinité, en régime transitoire, de façon continue sur toute la période investiguée, soit de la fin de la déglaciation jusqu'à aujourd'hui. Ce modèle plus élaboré devait pouvoir reproduire notamment le processus de formation de l'aquitard argileux, les effets de la densité variable de l'eau souterraine liés à sa salinité, l'évolution dynamique des conditions à la surface du modèle au gré des paléoconditions environnementales, et bien sûr la dynamique interne du système. La solution numérique de l'écoulement à densité variable des eaux souterraines y fut couplée à celle du transport de la salinité via la traduction perpétuelle de la salinité simulée en densité locale de l'eau. Les processus de transport de masse usuels ont été considérés, incluant la diffusion, l'advection et la dispersion hydrodynamique du soluté d'intérêt. Dans cette étude, la salinité a été considérée en tant que soluté unique et conservatif, c.-à-d. sans représentation des processus géochimiques pouvant en réalité modifier sa composition.

Les résultats produits par ce modèle paléo-hydrogéologique numérique bidimensionnel ont été exploités de plusieurs façons. Premièrement, ils ont été valorisés tels quels en tant que scénario de reconstitution quantitative plausible de l'évolution postglaciaire de la dynamique d'écoulement des eaux souterraines et de la migration associée de la salinité dans le système aquifère régional à l'étude. Deuxièmement, ils ont été analysés afin d'évaluer les rôles, l'importance et les effets des différents processus interactifs participant au transport souterrain de la salinité, désormais en

contexte spatialisé (bidimensionnel). Troisièmement, les résultats 2D simulés ont été examinés dans leur ensemble pour en dégager les caractéristiques principales propres aux phénomènes d'invasion du système aquifère régional par les eaux marines, de migration interne de la salinité souterraine, puis de lessivage du milieu souterrain.

La plausibilité des modèles, tant unidimensionnels que bidimensionnels, a été vérifiée d'une part en s'assurant d'utiliser des paramètres basés sur des données de caractérisation appropriées et fiables puisées dans la littérature, et d'autre part en veillant à ce que l'état final (actuel) simulé par chacun des modèles hydrogéologiques numériques soit globalement compatible avec l'état présentement observé dans la région d'étude, principalement en termes de salinité de l'eau. Les modèles ont été calés manuellement, en ajustant par essais et erreurs certains de leurs paramètres ayant de plus grandes incertitudes.

Deux environnements logiciels de simulation numérique ont été utilisés pour réaliser ces travaux. L'environnement de programmation R (R Core Team, 2017) a été utilisé pour préparer les données d'entrée nécessaires à la construction de tous les modèles numériques de cette étude. Une majorité des modèles hydrogéologiques numériques ont été préparés puis simulés avec le logiciel FEFLOW (Diersch, 2014). Certains modèles numériques unidimensionnels, toutefois, ont plutôt été conçus et solutionnés dans R. De plus, des plugins de type "IFM" (de l'anglais "FEFLOW Interface Manager") ont été programmés en langage C++, parallèlement à la préparation des modèles numériques FEFLOW, afin de gérer la mise à jour des paramètres transitoires du problème et l'extraction des résultats du modèle tout au long de la simulation. L'analyse des résultats des simulations numériques générés dans FEFLOW, incluant notamment la production de graphiques, a en très grande partie été réalisée au moyen de programmes conçus en langage R ; seuls les résultats spatialisés pour l'ensemble du système modélisé ont été analysés à même l'interface graphique du logiciel FEFLOW.

Au lecteur intéressé : noter que la majorité des programmes informatiques développés dans le second volet de la thèse sont fournis dans l'Annexe A8.3, tandis que les modèles numériques et leurs résultats simulés sont rassemblés dans l'Annexe A8.4.

4.2 Résultats clés et discussion

Préalablement aux simulations numériques, la revue de littérature effectuée pour les fins de cette étude a permis de bâtir un modèle conceptuel (Figure 11) intégrant un ensemble judicieusement simplifié des composantes requises pour aborder ensuite le problème à l'étude avec les outils quantitatifs que sont les modèles numériques. La grande majorité des simplifications faites ont ainsi pu être appuyées par les conclusions d'études antérieures et par diverses informations qualitatives ou (dans le cas idéal) quantitatives trouvées dans la littérature.

En particulier, trois paléoconditions environnementales ont finalement été retenues pour résumer les processus de l'environnement superficiel pouvant influer sur la dynamique, et toutes trois résumées sous la forme de séries temporelles schématiques (Figure 11). La première décrit ainsi l'évolution du niveau d'eau relatif (NER) sur toute la période investiguée. La seconde représente la salinité des eaux du fond marin tout au long de l'épisode de la Mer de Champlain. Nos recherches dans la littérature ont de fait mené au constat qu'il était important de concentrer la description de la salinité marine sur ses eaux profondes puisque ce sont elles, typiquement plus salées en raison de la stratification des eaux, qui sont en contact direct avec le système aquifère. Enfin, la troisième série temporelle décrit l'épaississement de l'aquitard argileux pendant l'épisode marin. Des travaux préliminaires avaient en effet révélé l'importance de considérer au moins le rôle hydraulique de cette épaisse couche de sédiments relativement imperméable (Laurencelle *et al.*, 2014) (voir Annexe A0.3). Une fois le modèle conceptuel bien défini, les modélisations numériques ont dès lors pu être réalisées.

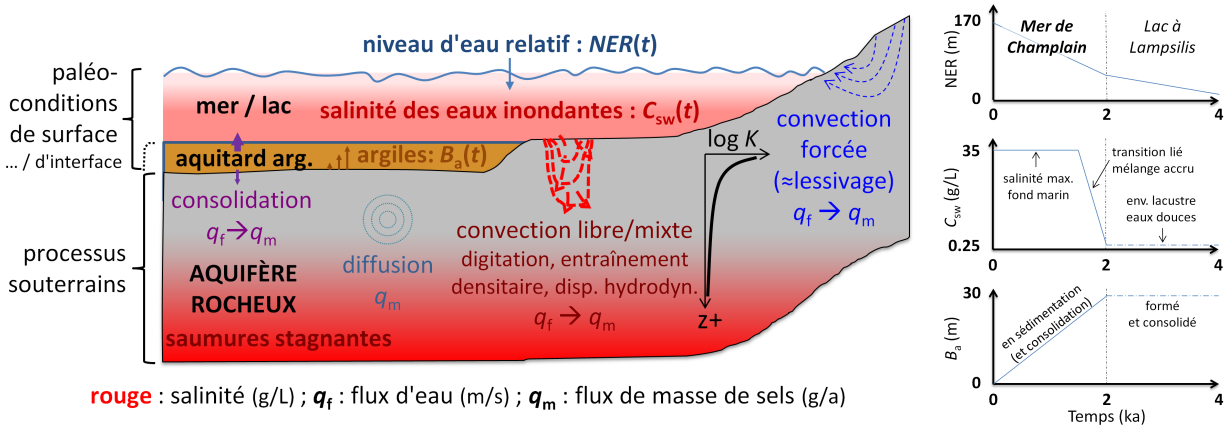


Figure 11 : Illustration schématique de la conceptualisation du problème paléo-hydrogéologique.

Les résultats des travaux de modélisation numérique de ce volet ont démontré l'impact majeur de la sédimentation d'un aquitard argileux sur le fond marin, non seulement pendant mais aussi après la formation de l'aquitard. De par sa faible conductivité hydraulique, l'aquitard en formation a tôt fait de freiner l'invasion marine directe de l'aquifère rocheux sous-jacent. La période d'invasion marine ouverte à la mer et dominée par l'entraînement densitaire (vers le bas) des eaux marines est ainsi très courte (de l'ordre de 250 ans). Une partie de la salinité emmagasinée dans le grand volume d'eau piégée dans l'aquitard (Figure 12a) continue toutefois à être émise dans l'aquifère par un lent transfert principalement diffusif-dispersif même après que l'aquitard soit entièrement formé. Le réservoir de salinité qu'est l'aquitard prolonge de ce fait l'invasion d'eau marine dans l'aquifère au moins jusqu'à aujourd'hui (Figure 12b).

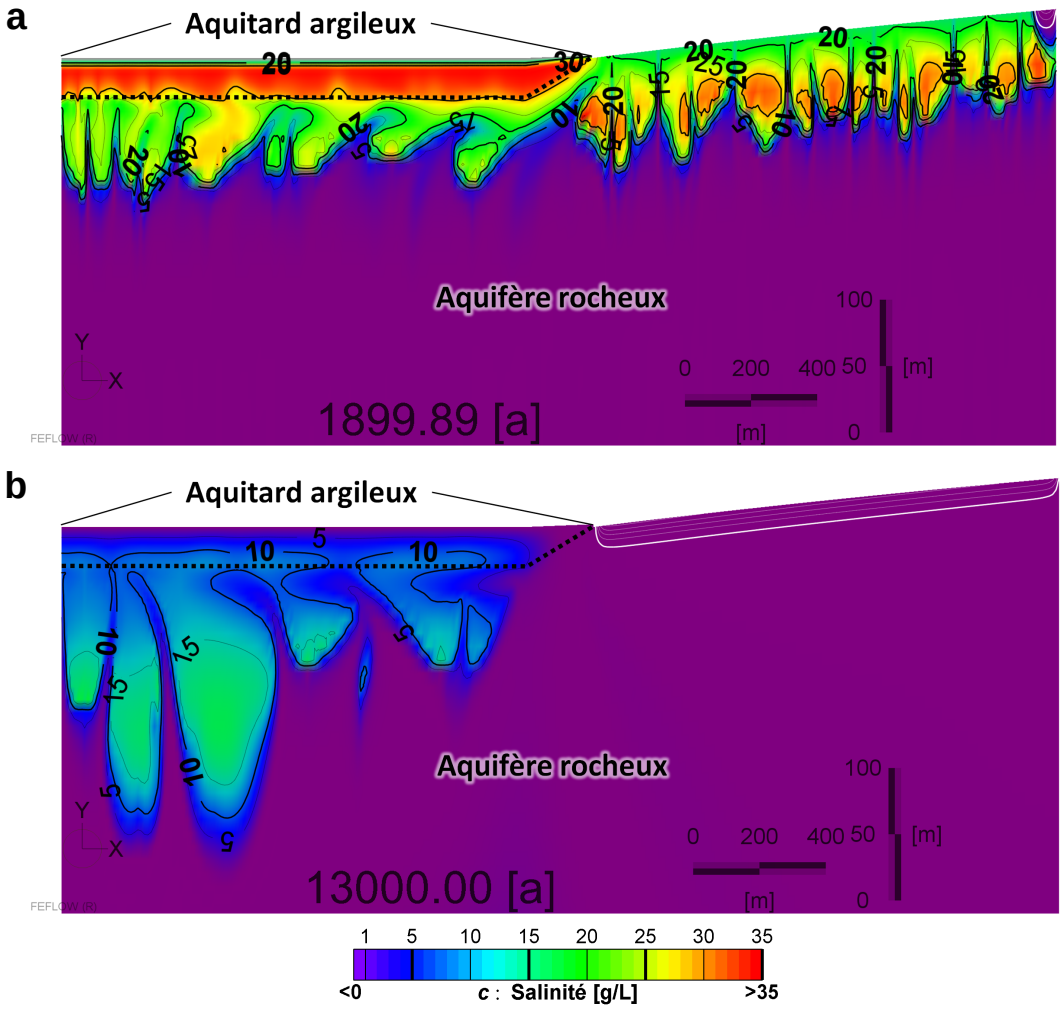


Figure 12 : Distribution spatiale de la salinité au sein du système aquifère régional simulée par le modèle numérique « D1 » du Chapitre 8, à : (a) *t* = 1.9 ka ; (b) *t* = 13.0 ka. Interface aquifère-aquitard indiquée par un trait en pointillé. Longueur du modèle : 3 km. Exagération verticale de 4X.

De plus, l'aquitard piège dans l'aquifère rocheux supérieur de l'eau douce déplacée vers le haut lors de l'invasion marine de l'aquifère. L'eau douce migrant vers le haut en contrepartie de la plongée densitaire des eaux salées, le tout par le jeu de la convection libre des eaux souterraines à densité variable, s'accumule ainsi à de faibles profondeurs sous l'aquitard (Figure 12b). Enfin, l'aquitard empêche la recharge directe de l'aquifère et le lessivage de l'eau marine, menant ainsi à la conservation d'importants volumes d'eau souterraine saumâtre dans le système aquifère régional, tel qu'observé aujourd'hui en Montérégie Est (Figure 12b).

Les résultats ont montré aussi que la profondeur de pénétration de l'eau marine dans l'aquifère rocheux apparaît fortement contrôlée et limitée par la réduction de la conductivité hydraulique (K) avec la profondeur dans celui-ci. En effet, l'invasion marine simulée avec un modèle numérique comparatif considérant une K diminuant moins rapidement avec la profondeur dans l'aquifère rocheux (et donc globalement plus élevée), s'est avérée beaucoup rapide et étendue, notamment en profondeur (voir Chapitre 8, Section 5.D). Cela souligne l'importance de caractériser le profil vertical de K de l'aquifère rocheux régional d'une manière rigoureuse telle que proposée dans le premier volet de cette thèse (Chapitre 3).

Aussi a-t-on mis en évidence que c'est principalement la diffusion qui, profitant d'une longue période de plus de 11 000 ans suivant la période de salinité maximale des eaux inondantes marines, restreint l'évolution post-marine des salinités dans le système aquifère régional. En effet, la diffusion rabaisse graduellement la salinité maximale pouvant être rencontrée dans la partie supérieure du système aquifère, en évacuant peu à peu son stock de salinité vers la surface (voir à titre d'exemple la forte décroissance des salinités à proximité du toit du système aquifère amorcée dès la diminution de la salinité des eaux marines inondantes, dans la Figure 12a). C'est ainsi que la salinité maximale dans le système aquifère (hors saumures profondes) a pu passer de celle des eaux marines initialement introduites (~35 g/L) jusqu'à celle d'eaux saumâtres (~12 g/L) telles qu'observées aujourd'hui dans la région d'étude. La diffusion apparaît donc un mécanisme majeur à presque tous les niveaux dans le processus d'invasion marine.

De plus, les résultats de l'exercice de modélisation du processus de consolidation des argiles au cours de la formation de l'aquitard (voir Chapitre 8, Section 5.C) ont montré que ce processus hydromécanique intimement couplé à la sédimentation des argiles est capable de transférer des volumes considérables d'eaux salées vers l'aquifère durant l'épisode marin. Les simulations suggèrent, en effet, que les volumes expulsés vers l'aquifère rocheux par sédimentation-consolidation pourraient équivaloir à près de la moitié des volumes introduits par la convection

libre essentiellement durant les 250 premières années de l'épisode marin, soit avant que l'aquitard ne « déconnecte » hydrauliquement l'aquifère de la mer occupant le bassin régional.

C'est néanmoins à la convection-dispersion que revient le rôle dominant dans la migration de la salinité au sein de l'aquifère rocheux, et ce, même dans ses zones captives (sous l'aquitard). C'est elle, en effet, qui contrôle la répartition et la lente homogénéisation, encore largement inachevée à ce jour, de la salinité souterraine dans l'aquifère rocheux (Figure 12b). Dans les zones plus élevées du système aquifère où il n'y a aucune accumulation d'argiles, le lessivage des eaux salées par la circulation d'eaux douces s'avère le processus dominant dès le retrait des eaux inondantes et le passage à des conditions émergées de recharge continuelle en eaux douces (constater, dans la portion droite de la Figure 12b, l'absence d'eaux salées ainsi que la présence de courbes blanches indiquant des lignes de courant très actives). Ce lessivage mène, de fait, à l'évacuation quasi-totale de la salinité précédemment introduite dans ces zones de l'aquifère libres de couverture argileuse. À l'opposé, le lessivage de l'aquifère rocheux s'avère pratiquement nul dans les zones basses où l'aquifère demeure isolé hydrauliquement de la surface par un épais aquitard argileux, expliquant la présence actuelle d'eaux souterraines saumâtres dans les grandes zones captives de l'aquifère régional (Figure 12b, portion gauche).

Les résultats de cette étude paléo-hydrogéologique montrent, en outre, qu'il est fort probable que les eaux profondes de la Mer de Champlain aient eu une salinité marine normale (~35 g/L) durant la plus grande partie de l'épisode marin (voir la Figure 13, résumant la Figure 56 plus détaillée du Chapitre 8). En effet, les salinités simulés dans l'aquitard et l'aquifère rocheux en considérant une eau marine ayant une salinité réduite à 12 g/L (ou sinon 24 g/L) reproduisent très mal les salinités observées dans le système aquifère réel (Figure 13b). Les salinités maximales observées aujourd'hui dans la zone d'eaux saumâtres en Montérégie Est (~12 g/L) ne seraient donc pas directement représentatives d'une eau marine diluée au départ, mais plutôt le résultat de la longue évolution interne des salinités au sein du système aquifère, évolution bien sûr largement influencée par les paléoconditions environnementales régionales.

Certes, l'approche originale suivie dans ce second volet de la thèse présente de nombreux aspects perfectibles, ou incomplets. D'abord, notre connaissance des paléoconditions et des propriétés du système aquifère-aquitard est limitée. De plus, le portrait des conditions d'invasion représenté par les différentes modélisations est simple, voire simpliste, et pourrait ne pas être suffisamment représentatif des conditions passées réelles. Néanmoins, les salinités simulées sont compatibles avec les salinités observées, tant dans l'aquitard que dans l'aquifère, ce qui montre que les résultats de nos modélisations numériques sont bel et bien vraisemblables.

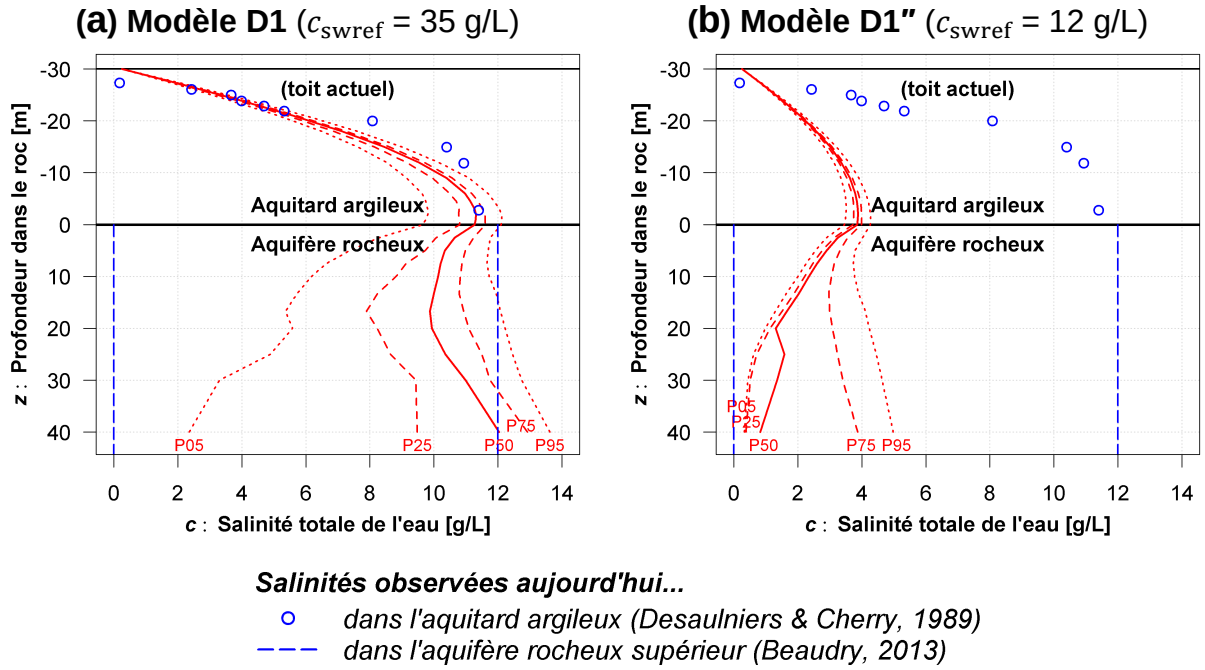


Figure 13 : Comparaison des salinités simulées pour le temps actuel (*t* = 13 ka) aux salinités observées au site de Varennes pour l'aquitard argileux (Desaulniers & Cherry, 1989) et dans la partie nord-ouest de la région d'étude pour l'aquifère rocheux supérieur (Beaudry *et al.*, 2018). Les salinités sont rapportées en fonction de la profondeur dans l'aquifère rocheux (*z*). (a) Résultats du modèle optimal « D1 » considérant une salinité marine maximale de 35 g/L (100 % de la salinité moyenne des océans ; (b) Résultats du modèle comparatif « D1″ » considérant une salinité marine maximale de 12 g/L (~1/3 de la salinité moyenne des océans). Les courbes rouges indiquent différents percentiles (dont la médiane : "P50") calculés en fonction de *z* à partir des salinités actuelles simulées dans le premier tiers gauche du modèle numérique (x ≤ 1.0 km), tant dans l'aquitard argileux (pleinement formé) que dans l'aquifère rocheux supérieur (z ≤ 40 m). Les lignes bleues pointillées indiquent les salinités minimale et maximale observées dans l'aquifère rocheux supérieur (indépendamment de la profondeur dans celui-ci). À noter : le modèle D1 et sa variante D1″ considèrent tous deux une décroissance normale de K(z).

CHAPITRE 5 : CONCLUSION

Une compréhension de la dynamique d'écoulement des grands systèmes aquifères régionaux est requise pour supporter la gestion durable des ressources en eau souterraine, mais acquérir une telle compréhension présente de nombreux défis à la fois scientifiques et techniques. La pérennité des ressources en eau souterraine est menacée par les impacts potentiels des changements climatiques, particulièrement pour les aquifères côtiers où le changement relatif du niveau marin peut mener à l'invasion d'eau marine. L'étude des paléoconditions et de l'impact d'événements géologiques majeurs sur les aquifères peut nous éclairer sur les conséquences des conditions environnementales susceptibles d'affecter les ressources régionales en eau souterraine. Afin de comprendre quantitativement la dynamique des systèmes aquifères et prédire l'impact de changements dans leurs conditions, il est nécessaire de disposer d'estimés de leurs propriétés hydrauliques qui soient représentatifs à l'échelle régionale. Pour les systèmes aquifères rocheux sédimentaires, ces estimés doivent considérer la réduction de la conductivité hydraulique avec la profondeur, réduction qui est communément observée. Les travaux réalisés dans le cadre de cette thèse avaient pour but à la fois de développer des approches fournissant de meilleures estimations de la conductivité hydraulique à l'échelle régionale et d'utiliser ces estimés pour étudier l'impact de changements importants des paléoconditions sur la salinité de l'eau souterraine. La région de la Montérégie Est, dans le sud du Québec au Canada, offre un milieu opportun pour réaliser de tels travaux, d'abord parce qu'elle a fait récemment l'objet d'une évaluation des ressources régionales en eau souterraine ayant produit un portrait détaillé de ses conditions hydrogéologiques (Carrier *et al.*, 2013). Et ensuite, parce que son système aquifère régional se distingue par la présence d'eaux saumâtres couvrant plus de 2 000 km^2, et dont l'origine proviendrait de l'invasion de la Vallée du Saint-Laurent par les eaux salées de la Mer de Champlain, un bras de mer de l'océan Atlantique, il y a environ 13 000 ans. Ce système aquifère offre ainsi un cas de référence témoignant de la réponse à long terme d'un système aquifère soumis à la perturbation majeure que représente une invasion marine. Les travaux de la thèse se sont déclinés en deux grands volets : un premier volet s'intéressant à la caractérisation hydraulique des systèmes aquifères fracturés, et un second volet consacré à l'étude du système aquifère régional de la Montérégie Est dans une nouvelle perspective paléo-hydrogéologique.

5.1 Sur la caractérisation hydraulique des systèmes aquifères fracturés

Dans les travaux du premier volet, une approche de caractérisation hydraulique conventionnelle a d'abord été tentée. Cette approche conventionnelle consiste à estimer des valeurs de transmissivité (T) à partir de données d'essais de capacité spécifique réalisés dans des puits ouverts au roc, pour ensuite en dériver directement des valeurs de conductivité hydraulique (K) en divisant les estimations de T obtenues préalablement par les longueurs des intervalles ouverts au roc de chaque puits. Enfin, des profils statistiques décrivant la décroissance de K en fonction de la profondeur dans le roc sont déduits à partir de ces valeurs de K expressément jumelées à des données sur la profondeur des puits. Or, à force de tests et de recherche exploratoire, plusieurs lacunes importantes ont été constatées dans cette approche conventionnelle. D'abord, au niveau de l'estimation de la transmissivité à partir de données d'essais de capacité spécifique, nos travaux ont mis en lumière que la méthode analytique la plus couramment utilisée, basée sur la solution de Theis, est en fait trompeuse en ce qu'elle fournit des estimations de T d'apparence plausible même lorsque les paramètres d'essai sont physiquement incohérents, en plus de montrer une tendance systématique à la surestimation en présence de milieux modérément à peu perméables. Cette inadéquation de la méthode d'estimation de T basée sur la solution de Theis est liée au fait qu'elle ne considère pas l'effet de l'emmagasinement dans le puits sur les rabattements induits au puits lors d'essais de pompage de courte durée, notamment les essais de capacité spécifique. En plus d'amalgamer les T issues de données d'essais cohérentes et incohérentes, l'approche conventionnelle n'aborde pas quantitativement la question de la fiabilité des estimations de T obtenues. En réponse à ces lacunes de l'approche conventionnelle d'estimation de la T, une nouvelle approche basée sur une solution analytique mieux adaptée aux conditions typiques des essais de capacité spécifique a été développée (Chapitre 6). La solution choisie, de Papadopulos-Cooper, permet désormais de détecter les essais physiquement incohérents, étant donné que l'effet de l'emmagasinement dans le puits est pris en compte dans sa formulation. Mais surtout, la nouvelle méthodologie développée dans cette étape de la thèse vient proposer des outils opérationnels et efficaces pour évaluer l'incertitude associée aux estimations de T dérivées de données d'essais de capacité spécifique. Les analyses d'incertitude réalisées montrent que la fiabilité des estimations de T est en réalité limitée et varie selon les paramètres d'essai. Plus spécifiquement, ces analyses révèlent que les T estimées ne sont typiquement quantitativement fiables qu'à l'intérieur d'un intervalle d'à peine plus de deux ordres de grandeur et centré sur des T intermédiaires. Dans la région d'étude, à titre d'exemple, on obtient très peu d'estimations quantitativement fiables de T en-deçà de 10^{-6} m^2/s — borne

inférieure qui, bien que dérivée d'un jeu de données particulier, est vraisemblablement appropriée pour d'autres jeux de données de capacité spécifique, puisque les paramètres récurrents dans nos données sont, de fait, très communs. La méthodologie développée offre également une stratégie simple d'application pour exploiter les estimations non quantitativement fiables ; stratégie basée sur le principe qu'à toute estimation, même non quantitativement fiable, correspond une gamme plus ou moins large de T réelles probables. Ainsi, cette nouvelle méthodologie permet-elle d'exploiter l'ensemble des estimations de T, tant « quantitatives » que « qualitatives », dans une démarche plus cohérente et avisée que ne le permettait à ce jour l'approche conventionnelle d'estimation de la T.

L'étape suivante a consisté, dans la même veine exploratoire, à tester d'abord l'approche conventionnellement utilisée pour dériver la K à partir d'estimations de T. À nouveau, il a vite été constaté que l'approche conventionnelle présentait des failles conceptuelles importantes. Il est donc apparu intéressant, et même nécessaire, de développer une approche de rechange. Les travaux correspondant au second article de la thèse (Chapitre 7) ont ainsi été consacrés à la recherche d'une approche opérationnelle permettant de déduire des statistiques sur la conductivité hydraulique équivalente (K_b) d'un système aquifère rocheux régional à partir de données de T estimées dans des puits ouverts au roc. En un premiers temps, nos travaux ont permis d'identifier plus précisément la nature du problème à résoudre, par le biais d'une conceptualisation détaillée. Le défi alors était de relier les données de T estimées (dépendant de l'entièreté de l'intervalle du puits ouvert au roc) aux propriétés hétérogènes du milieu fracturé (connues pour varier rapidement avec la profondeur, même à l'échelle des profondeurs typiques des puits d'eau résidentiels). Une approche par simulation Monte Carlo a été retenue. Cette approche, bien que plus élaborée que l'approche conventionnelle, s'est avérée néanmoins très simple d'application une fois les développements méthodologiques achevés. Les résultats obtenus par l'application de notre nouvelle approche à l'aquifère rocheux fracturé de la région d'étude ont permis d'établir que l'approche conventionnelle est inappropriée. Notre étude, en effet, a mis en évidence que la tendance à la décroissance de T avec la profondeur, typiquement obtenue en exploitant des données de capacité spécifique, est en fait due à un important biais dans les données jumelées de T et de profondeur de puits, biais qui serait lié aux pratiques de forage des puisatiers. Un mode de forage « non biaisé » a donc été conçu dans le but de comparer explicitement les tendances avec la profondeur obtenues pour la T selon que l'échantillonnage de l'aquifère se fait à des profondeurs aléatoires (non biaisées) ou non (biaisées). Les résultats sont

formels : seul le mode biaisé produit une tendance décroissante ; en mode non biaisé, une tendance croissante est obtenue, tel qu'attendu par simple bon sens. En outre, nos travaux ont montré que, dans le contexte des simulations effectuées, l'hétérogénéité des ouvertures et donc des transmissivités des fractures a un impact nettement plus important sur la distribution des profondeurs des puits simulés que ne l'ont la diminution avec la profondeur de l'ouverture moyenne des fractures ou encore celle de la densité de fractures. En transposant ces constats au contexte réel, on peut déduire que la profondeur d'arrêt du forage décidée par les puisatiers, et donc indirectement la tendance à la décroissance de T souvent notée, serait contrôlée surtout par la forte hétérogénéité des propriétés hydrauliques du milieu rocheux fracturé. Enfin, d'un point de vue plus spécifique à la région d'étude, l'application de notre approche à la description de la variabilité verticale de $K_b(z)$ dans le système aquifère rocheux régional de la Montérégie Est met en évidence des écarts importants des nouveaux résultats par rapport aux résultats issus de l'approche conventionnelle, écarts qui peuvent dépasser parfois deux ordres de grandeur. L'approche conventionnelle semblerait donc portée vers une surestimation quasi systématique, parfois même déraisonnable, des statistiques de $K_b(z)$. C'est d'ailleurs, à notre connaissance, la première fois qu'une étude scientifique bien étayée remet complètement en question l'approche conventionnelle, en exposant ses insuffisances, ses failles conceptuelles ainsi que la piètre qualité de ses prédictions pour $K_b(z)$.

En somme, l'approche par simulation Monte Carlo développée pour compléter ce volet de la thèse a pu montrer sa plausibilité conceptuelle, sa pertinence en général de même que son efficacité en contexte d'application pratique. Considérant les nombreuses insuffisances de l'approche conventionnelle encore fréquemment utilisée aujourd'hui, il appert donc important de partager ces nouvelles connaissances afin que l'approche conventionnelle soit progressivement délaissée et remplacée par une approche plus rigoureuse, telle celle proposée dans cette thèse.

En termes de perspectives, il serait intéressant, entre autres choses, d'essayer des modèles alternatifs de milieux fracturés hétérogènes, de tenter une approche d'optimisation davantage automatisée des paramètres du modèle stochastique lors de son calage aux observations par exemple en utilisant le logiciel PEST (Doherty, 1994) et, pour finir, de clarifier l'approche ainsi que les critères à utiliser pour découper le territoire investigué en zones « modélisables » c'est-à-dire à l'intérieur desquelles on peut considérer qu'à la fois le biais d'échantillonnage par les puisatiers et l'hydraulique du milieu fracturé suivent des principes et configurations similaires.

5.2 Sur l'étude paléo-hydrogéologique d'un système aquifère régional

Le second volet de la thèse s'est penché sur l'étude paléo-hydrogéologique du système aquifère régional de la Montérégie Est. L'élément déclencheur de ces travaux de recherche fut le constat de la présence d'une vaste zone d'eaux souterraines saumâtres sur plus de 2 000 km^2 au nord-ouest de la région, eaux saumâtres dont l'origine marine a déjà été confirmée et attribuée à la Mer de Champlain qui a envahi la Vallée du Saint-Laurent il y a quelque 13 000 ans. Bien que plusieurs facteurs aient déjà été énoncés dans diverses études pour expliquer la persistance d'eaux saumâtres dans ce secteur, très peu d'études s'étaient jusqu'alors penchées sur la problématique d'un point de vue quantitatif, et encore moins à l'échelle du système aquifère entier — c'est-à-dire comprenant à la fois l'aquifère rocheux régional et le vaste aquitard argileux le recouvrant dans les basses terres de la région. Les visées de ces travaux étaient multiples. Nous avons commencé par aborder le problème de l'invasion marine du système aquifère de façon conceptuelle afin d'identifier, dans la littérature et par des recherches exploratoires, quelles étaient les composantes à considérer en priorité pour décrire les dynamiques autant du système aquifère que de son environnement d'alors. Une fois le problème conceptualisé, celui-ci a été traduit sous la forme de modèles numériques, en suivant une logique de complexité et de réalisme croissants. Tout d'abord, nous avons investigué le seul processus de la diffusion de la salinité au sein de l'aquitard argileux recouvrant l'actuelle zone saumâtre dans la région. Ensuite, nous y avons ajouté le processus d'advection pour en évaluer l'incidence. Puis, nous avons étudié les effets de la sédimentation-consolidation, notamment en termes d'expulsion d'eau marine de l'aquitard. Enfin, à l'aide du logiciel FEFLOW, l'ensemble des paléoconditions et processus retenus dans la conceptualisation ont été simulés de façon combinée et couplée dans des modèles 2D schématisant une coupe verticale représentative de la région.

Considérés dans leur ensemble, les résultats démontrent d'abord l'impact majeur qu'a la sédimentation d'un aquitard argileux (au fond de la Mer de Champlain) non seulement pendant mais aussi après l'épisode marin. L'aquitard en formation a tôt fait de freiner l'invasion marine directe de l'aquifère rocheux sous-jacent. Une partie de la salinité emmagasinée dans le grand volume d'eau piégée dans l'aquitard continue toutefois à être émise dans l'aquifère et ce, même après que l'aquitard soit entièrement formé. La consolidation de l'aquitard argileux pendant sa formation apparaît également capable de transférer des volumes considérables d'eaux salées vers l'aquifère rocheux. De plus, les simulations numériques en 2D montrent que la pénétration de l'eau marine dans l'aquifère rocheux dépend fortement du taux de décroissance de la conductivité hydraulique avec la profondeur dans celui-ci. Elles révèlent également que de l'eau

douce migrant vers le haut dans l'aquifère rocheux parallèlement à la plongée d'eaux marines sous l'effet de leur densité relative, peut s'accumuler à proximité de la base de l'aquitard. Mais surtout, elles montrent à quel point la digitation et l'entraînement densitaire des eaux salées introduites dans l'aquifère rocheux y sont des mécanismes d'invasion importants, et encore actifs aujourd'hui. Le lessivage des eaux salées par la circulation convective d'eaux douces dans l'aquifère rocheux supérieur devient le processus prédominant dès le retrait des eaux inondantes, dans les zones plus élevées et libres d'argiles, menant à une évacuation quasi complète des eaux marines précédemment introduites dans ces zones. À l'opposé, là où la couverture argileuse est épaisse, le lessivage de l'aquifère rocheux s'avère quasi nul. Les résultats révèlent aussi, non sans surprise, que c'est principalement la diffusion qui contrôle l'évolution post-marine de la salinité maximale pouvant être rencontrée dans la partie supérieure du système aquifère-aquitard, principalement en évacuant peu à peu son stock de salinité vers la surface. Les résultats montrent, en outre, qu'il est fort probable que les eaux profondes de la Mer de Champlain aient eu une salinité marine normale (~35 g/L) durant la plus grande partie de l'épisode marin, ce qui est en contradiction avec des travaux antérieurs ayant affirmé que l'eau de la Mer de Champlain était diluée.

En somme, l'étude paléo-hydrogéologique et les exercices de modélisation conceptuelle puis numérique réalisées dans ce second volet de la thèse ont rempli, et même dépassé, les objectifs fixés au départ. En effet, les travaux de ce volet ont :

- proposé une reconstitution quantitative de l'évolution postglaciaire jusqu'alors très peu connue de la dynamique d'écoulement des eaux souterraines et de la migration associée de la salinité dans le système aquifère régional de la Montérégie Est ;
- documenté les rôles ainsi que l'importance relative des processus ayant contrôlé cette évolution, tant en termes de circulation convective des eaux souterraines due à leur densité variable, d'expulsion d'eau interstitielle marine de l'aquitard sous l'effet de sa sédimentation-consolidation, que de transport de masse convectif-dispersif de la salinité à l'échelle du système aquifère régional entier ;
- montré que les eaux souterraines saumâtres observées aujourd'hui dans la région résultent de cette longue évolution postglaciaire, et non pas d'une Mer de Champlain dont les eaux de fond auraient été diluées dès le début de l'incursion marine ;
- souligné l'incidence majeure de la conductivité hydraulique de l'aquifère sur le processus d'invasion et, ainsi, valorisé les résultats des travaux du premier volet de la thèse ;

- contribué à l'amélioration de la connaissance et de la compréhension des processus d'invasion marine des aquifères rocheux, ainsi qu'à l'identification de paléoconditions environnementales ayant une grande importante paléo-hydrogéologique.

Nous estimons que les concepts et processus représentés dans nos modélisations, d'une part, et les outils de simulation numérique développés au cours de ces travaux, d'autre part, devraient être applicables à l'étude paléo-hydrogéologique d'autres régions ayant subi des invasions marines postglaciaires, et probablement aussi à la résolution de quantité d'autres problèmes hydrogéologiques de nature ou d'échelle temporelle différentes n'ayant que certains aspects en commun avec le problème d'invasion marine qui fut investigué dans cette thèse.

Enfin, ces travaux paléo-hydrogéologiques ouvrent de nombreuses de perspectives. Notamment, les modèles numériques 2D développés pourront être supplémentés par la simulation du transport d'âge afin d'étudier l'évolution hautement transitoire de l'âge apparent de l'eau souterraine en contexte d'invasion marine. Des modèles numériques plus complets, précis et complexes, notamment en termes de paléoconditions, d'étendue, topographie et stratigraphie représentées, d'hétérogénéité ou encore de double porosité du système aquifère, pourront être envisagés. Mais à plus court terme, il sera judicieux de commencer par intégrer le processus de sédimentation-consolidation aux modélisations numériques 2D, d'une part, et concevoir une stratégie technique permettant de quantifier les transferts internes de salinité (flux de masse) au sein des modèles numériques 2D, d'autre part ; deux défis qui nous paraissent prioritaires.

5.3 Conclusion générale

Dès l'amorce de ce projet, il a été jugé nécessaire de disposer d'estimés de la conductivité hydraulique (K) représentatifs des conditions régionales afin de reconstituer de façon plausible le processus d'invasion marine. Les résultats de nos travaux ont de fait montré l'importance critique de la K sur la dynamique d'invasion. En effet, même si l'aquitard argileux exerce un contrôle majeur sur l'entrée puis la préservation d'eau marine dans l'aquifère rocheux sous-jacent, la profondeur d'invasion et, plus généralement, la distribution spatiale de l'eau marine dans l'aquifère apparaissent aussi largement contrôlées par la réduction de la K avec la profondeur. Un modèle hydrogéologique numérique en coupe verticale 2D représentant la partie nord de la région d'étude et considérant le profil vertical de K(z) estimé dans le premier volet de la thèse — pour le contexte

hydrogéologique de la Plate-forme du Saint-Laurent, où siègent les eaux saumâtres — a simulé des salinités de l'eau souterraine concordant avec celles observées aujourd'hui dans l'aquitard argileux et l'aquifère rocheux, en particulier dans la zone d'eaux souterraines saumâtres. Ce modèle « D1 », calé aux observations tant hydrauliques (capacité spécifique → transmissivité → conductivité hydraulique du roc) qu'hydrogéochimiques (salinité des eaux souterraines), offre dorénavant une reconstitution quantitative crédible de l'évolution postglaciaire de la dynamique d'écoulement des eaux souterraines et de la migration associée de la salinité dans le système aquifère régional de la Montérégie Est. De même, le modèle conceptuel général conçu pour traiter le problème paléo-hydrogéologique des invasions marines postglaciaires constitue une autre contribution scientifique majeure de cette thèse.

Ces travaux doctoraux apportent également des contributions scientifiques importantes d'un point de vue pratique. En effet, l'ensemble des outils informatiques conçus par l'auteur principal de la thèse sont mis à disposition du public dans le but que ces outils soient utilisés au-delà de ce projet doctoral. Les auteurs des travaux du volet « hydraulique » de la thèse espèrent tout particulièrement que les concepts, méthodologies opérationnelles et outils informatiques des Chapitres 6 et 7 de la thèse (permettant la caractérisation de la variabilité verticale de la K dans des systèmes aquifères rocheux fracturés régionaux par l'exploitation raisonnée de données d'essais de capacité spécifique) se propagent peu à peu au sein de la communauté scientifique.

La nature imparfaite des données disponibles sur la capacité spécifique, la fiabilité limitée des estimations de transmissivité puis de conductivité hydraulique dérivées de celles-ci, les limites de nos connaissances sur la structure hydraulique de l'aquifère et notre reconstitution nécessairement simplifiée des paléoconditions imposent toutes, néanmoins, une marge d'incertitude à nos résultats. Enfin, nonobstant que cette étude soit basée sur des conditions spécifiques à une région, les méthodes développées et les processus étudiés devraient être généralement applicables à plusieurs des autres régions du monde ayant connu des conditions analogues et constituent donc, à notre avis, un progrès scientifique intéressant dans l'étude du phénomène d'invasion marine.

ARTICLES

Chapitre 6 = Article 1

Chapitre 7 = Article 2

Chapitre 8 = Article 3

CHAPITRE 6 : RELIABILITY OF TRANSMISSIVITY ESTIMATES FROM SPECIFIC CAPACITY DATA

Titre traduit

Sur la fiabilité des estimations de transmissivité dérivées de données de capacité spécifique

Auteurs

Marc Laurencelle[1], René Lefebvre[1]

[1] Institut national de la recherche scientifique, Centre Eau Terre Environnement (INRS-ETE), 490 rue de la Couronne, Québec, Québec, Canada

Statut de la publication

A soumettre à la revue *Hydrogeology Journal*.

Contribution de l'étudiant et du co-auteur

Marc Laurencelle a réalisé la recherche exploratoire préalable et identifié l'intérêt de traiter la problématique, puis développé la méthodologie, produit les résultats, et rédigé l'article.

René Lefebvre a suivi étroitement les travaux, apporté des contributions majeures au niveau des concepts et stratégies d'abord du problème, et révisé et commenté en profondeur l'article.

Résumé

Les données de capacité spécifique (SC : de l'anglais "specific capacity") issues de tests de performance des puits d'eau sont fréquemment utilisées pour estimer la transmissivité (T), en particulier dans les études portant sur des aquifères régionaux. Dans la mesure où les données de SC sont beaucoup plus nombreuses et plus aisément accessibles que les données d'essais de pompage standards, elles peuvent apporter une image plus complète de la variabilité spatiale de T à l'intérieur de l'aquifère. L'approche conventionnellement utilisée pour estimer T à partir des données de SC est basée sur la solution de Theis. Ces estimations de T sont ensuite directement exploitées via des analyses statistiques, comme si ces estimations offraient toutes des approximations également fiables des valeurs réelles de T. Or, très peu de travaux ont cherché à évaluer de manière quantitative la fiabilité des estimations de T(SC).

L'objectif principal de ces travaux était ainsi d'évaluer la fiabilité et la précision des estimations de T dérivées de données de SC à l'aide de méthodes analytiques. Pour cela, deux méthodes analytiques d'estimation de T(SC) ont été considérées et comparées, à savoir la méthode conventionnelle basée sur la solution de Theis, et une nouvelle méthode d'estimation de T(SC) basée sur la solution de Papadopulos-Cooper qui, différemment de la solution de Theis, tient compte de l'emmagasinement dans le puits.

Les résultats de cette étude révèlent que la fiabilité des estimations de T(SC) est en réalité limitée et grandement variable. Les estimations de T ne s'avèrent quantitativement fiables qu'à l'intérieur d'une gamme limitée de T, et cela en conséquence directe des imprécisions (erreurs) dans les données de SC. Les résultats montrent également que la fiabilité des estimations de T est aussi restreinte à cause du rabattement disponible limité dans les puits testés. Or, bien que seules les estimations quantitativement fiables puissent être utilisées directement, les estimations non quantitativement fiables fournissent néanmoins des indications qualitatives pertinentes et exploitables quant aux T réelles. Une nouvelle approche permettant de réaliser des inférences éclairées quant aux T réelles à partir d'estimations de T(SC) produites via la méthode de Papadopulos-Cooper et d'indications qualitatives dérivées en parallèle est ainsi proposée, puis comparée à l'approche conventionnelle, à l'aide d'un cas d'étude. Cette application démontre l'importance de tenir compte de la fiabilité et de la précision limitées des estimations de T(SC) lors de l'exploitation de jeux de données de SC, et dévoile ainsi la nature potentiellement trompeuse des résultats obtenus à l'aide de l'approche conventionnelle.

Abstract

Specific capacity (SC) data from well-performance tests are commonly used to estimate transmissivity (T), especially in regional aquifer studies. Since SC data are much more abundant and readily available than time-drawdown data from aquifer tests, they can provide a more complete picture of the spatial variability of T within the aquifer. The conventional approach has been to use an analytical method based on the Theis solution for computing T estimates from the SC data. These T estimates are then analyzed statistically as if they were all giving equally reliable approximations of the actual T values. In fact, limited work has been done to quantitatively assess the reliability of T(SC) estimates. The main objective of this research was thus to assess the reliability and accuracy of T estimates derived from SC data by analytical methods. Two analytical T(SC) estimation methods were considered and rigorously compared: the conventional Theis-based method and a new T(SC) estimation method based on the Papadopulos-Cooper (PC) solution, which accounts for wellbore storage contrary to the Theis solution.

Results from this study reveal that the reliability of T(SC) estimates is in fact limited and highly variable. T estimates are found to be quantitatively reliable only within a limited range of T, as a direct consequence of the inaccuracies (errors) in the input SC data. Results also show that the reliability of the T estimates is further constrained by the limited “available drawdown” of the tested wells. However, while only the quantitatively reliable estimates provide directly usable estimates of actual T, the other estimates still can provide relevant and usable qualitative indications of T. A new approach for making well-informed inferences about the actual T from both the computed PC-based T(SC) estimates and the qualitative indications derived in parallel is thus proposed, and compared against the conventional Theis-based approach, through a case study. This application demonstrates the critical importance of considering the limited reliability and accuracy of T(SC) estimates when exploiting actual SC datasets, and thus exposes the potential misleading nature of results obtained from the conventional approach.

Keywords

transmissivity; specific capacity; analytical solutions; wellbore storage effect; reliability; input data errors

1. Introduction

Hydraulic conductivity (K) is a fundamental property of aquifer systems, and a key input of numerical groundwater flow models representing these systems. For large aquifer systems, K is typically inferred regionally from transmissivity (T) estimates obtained from the interpretation of short-duration pumping tests. At the site scale, it may be affordable to conduct several standard long-duration time-drawdown aquifer tests (also known as "constant-rate pumping tests"), the interpretation of which gives estimates of T that are generally considered reliable and accurate (Cooley & Naff, 1990). However, in practice, as such tests require a significant amount of time (typically 24 to 72 h) and resources, they are carried out only when the stakes are high, e.g. when installing new large-capacity water wells.

Alternatively, local aquifer productivity can be assessed by conducting specific-capacity (SC) tests (also called "well-performance tests", "well-production tests", or "well yield tests"). Such tests are routinely performed by water-well drillers to evaluate the specific capacity of wells immediately after their completion. Specific capacity is simply the discharge rate (Q) divided by the final drawdown in the pumped well at the end of the test ($s_{\mathrm{w.f}}$), thus: $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ (Kruseman & de Ridder, 1990; Wilson, 2005). Contrary to time-drawdown aquifer tests, SC tests have a short duration (typically about 1 h) and are easily carried out. The large number of low-capacity water wells for private water supply, compared to the fewer high-capacity wells for municipal and industrial water supply and the easiness of SC testing, explain why SC data are typically much more abundant (Meier *et al.*, 1999; Mace, 2001).

However, the literature suggests that interpretation of SC data gives only order-of-magnitude estimates of T (Brown *et al.*, 1963; Mace, 2001). Despite this, it is recommended to use these rough "T(SC)" (T-from-SC) estimates along with the T estimates from long-duration pumping tests to characterize regional aquifer systems (e.g. by Mace, 2001), since their combination provides a denser and more evenly distributed T spatial dataset, and hence narrows the uncertainty of derived statistics, notably due to the larger sample size (Cooley & Naff, 1990; Conover, 1999; Davis, 2002; Soong, 2004; Kinney, 2009) and also due to the improved spatial sampling (Gy, 1992; Chiles & Delfiner, 2009). This approach has been widely applied in different geological settings (Razack & Huntley, 1991; Huntley *et al.*, 1992; Rovey & Cherkauer, 1995; Mace, 1997; Nastev *et al.*, 2004; Lavigne, 2006; Razack & Lasm, 2006; Srivastav *et al.*, 2007; Rivard *et al.*, 2008; Rotzoll & El-Kadi, 2008; Verbovsek, 2008; Maharjan, 2011; Sterckx, 2013; Richard *et al.*, 2016).

The factors underlying the variability of SC test results are, for the most part, the same as those "affecting drawdown in a pumped well", and thus notably include pumping rate and duration, aquifer properties, wellbore storage, well and water-level depths, wellbore skin, and turbulent flow (Risser, 2010). This explains why SC is primarily controlled by T, and vice versa, as confirmed notably through sensitivity analyses of T(SC) estimation methods (e.g. Mace, 2001; McLin, 2005). Accordingly, many authors have proposed empirical relationships to estimate T from SC data (e.g. Razack & Huntley, 1991; Huntley *et al.*, 1992; Mace, 1997; Mace, 2001; Srivastav *et al.*, 2007; Rotzoll & El-Kadi, 2008; Verbovsek, 2008; Al Farrah *et al.*, 2013). However, quite often such empirical relations are of limited use outside of their original study areas, since they are specific not only to the encountered hydrogeological settings, but also to the predominant well construction and SC test parameters within each area. Alternatively, analytical methods based on well-known pumping test solutions have also been proposed for estimating T from SC data. The latter methods have the advantage of explicitly considering well hydraulics and test parameters in the estimation process, thereby constituting more general estimation tools. Still, these methods are not flawless, as they inevitably suffer from some practical limitations related to the simplifying and often unrealistic assumptions underlying the pumping test solution involved (Mace, 2001; Risser, 2010).

According to Mace (2001), the most commonly used and "preferred" analytical method for T(SC) estimation is that originating from Theis *et al.* (1963), which is in fact based on the Cooper-Jacob approximation of the Theis nonequilibrium equation for a well of negligible radius pumping in a confined radially-symmetric aquifer (Theis, 1935; Cooper & Jacob, 1946). However, the reliability of estimates from this method has not yet been thoroughly examined. In particular, the wellbore storage effect is inherently overlooked in the common approach by assuming infinitesimal diameter for the wells, even though this effect can be expected to be important considering the short duration of SC tests and the relatively large diameter (e.g., 6 inches) of most water wells (Papadopulos & Cooper, 1967; Risser, 2010). Furthermore, to our knowledge, no research has yet been carried out on the quantitative assessment of the uncertainty of T(SC) estimates arising from inaccuracies in the input (reported) SC data.

The overall objective of the present study is thus to assess the reliability and accuracy of transmissivity (T) estimates derived from specific capacity (SC) data by analytical methods. To meet this general objective, two analytical T(SC) estimation methods are described and then used and compared throughout the study: the first is the conventional method based on the Theis (1935) solution, whereas the second is a proposed new method based on the Papadopulos-Cooper

solution and thus explicitly considering the effect of wellbore storage (Papadopulos & Cooper, 1967).

In the first part of the study, the general efficacy of each of the two estimation methods is assessed. This consists in meeting the following specific objectives:

- Evaluate if the alternative estimation method based on the Papadopulos-Cooper solution generally provides more reliable T estimates than the conventional Theis-based method;
- Investigate the accuracy limitations of T estimates resulting from the uncertainties in the input SC data and, in particular, determine the T range in which T(SC) estimates may be considered quantitatively reliable.

In the second part of the study, the findings from the first part are effectively implemented for the hydraulic characterization of a regional fractured-rock aquifer system. This part of the study aims to address the following specific objectives:

- Provide a practical example of the application of the concepts and tools developed in this study for a more rigorous exploitation of SC datasets;
- Highlight the weaknesses of the conventional approach while revealing the advantages of the proposed new approach for T(SC) estimation and ensuing interpretation, now in a practical context.

2. Structure of the manuscript

First, the theory behind the two analytical T(SC) estimation methods is covered, starting with the description of specific capacity tests (Section 3.1), followed by the pumping test solutions involved (Sections 3.2 and 3.3). The dimensionless solutions, as well as some useful diagnostic ratios, are then presented (Sections 3.4 and 3.5). An explanatory example follows, which illustrates how drawdown at the end of a SC test depends on local aquifer transmissivity, and vice-versa, according to each pumping test solution (Section 3.6). Limit values for the input parameters of the T(SC) estimation algorithms are then deduced (Section 3.7). A first limitation threshold for T(SC) estimation, due to the finite depth of the pump below the static water well in any realistic well geometry, is then formulated (Section 3.8).

In Section 4, a sensitivity analysis is carried out to get a sense of how both estimation methods behave when one of their input parameters is varied, and thus to assess the relative influence of

each input parameter on the estimation of T(SC). This exercise is particularly relevant since it has not yet been documented for the Papadopulos-Cooper-based estimation method.

Then, the Monte Carlo approach we developed to investigate the uncertainties in the T(SC) estimates stemming from errors in reported SC data and hence inform on the reliability of individual estimates, is described and implemented (Section 5).

Thereafter, the developed concepts and tools are implemented into a practical workflow and applied to an actual regional case study (Section 6). This part aims to highlight the importance of considering the limited reliability of T(SC) estimates when exploiting actual SC datasets in a practical context.

Finally, implications of the study are discussed in terms of its strengths and limitations, and general conclusions are drawn (Section 7).

Some additional contents are provided as annexes. Annexe A6.1 offers a glossary of most symbols and abbreviations used in the notation used throughout this article. A sample of the output T(SC) dataset produced in the regional case study (Section 6) is provided as an example table in Annexe A6.2. The sensitivity of the “quantitatively reliable range” (an innovative concept defined in Section 5.2.2) to the SC test parameters (more precisely to both reference values and error magnitudes) is assessed in Annexe A6.3. Moreover, the program codes developed in the R language (R Core Team, 2017) for solving the many problems tackled in this research are provided in Annexe A6.4. Lastly, the full input SC dataset used, and the full output T(SC) dataset produced in the regional case study, are provided in Annexe A6.5.

3. Theory

3.1 Description of specific capacity tests

A pumping test is a controlled field experiment typically “used to estimate hydraulic properties of aquifer systems such as transmissivity, hydraulic conductivity and storativity” (Duffield, 2016c). “The most common form of pumping test is the constant-rate pumping test in which a control well is pumped at a constant rate and water-level response (i.e. drawdown) is measured in one or more surrounding observation wells and optionally in the control well itself” (Duffield, 2016c). A specific capacity test (“SC test”) is a short-duration constant-rate single-well pumping test routinely conducted by water-well contractors/drillers, primarily “to characterize the performance of a well

and determine the optimum depth for installing the pump to obtain the desired yield" (Wilson, 2005). The specific capacity of a well is defined as the pumping rate used during the test (Q) divided by the resulting "final" drawdown in the pumped well at the end of the test ($s_{\mathrm{w.f}}$) —hence the common notation "Q/s" (Kruseman & de Ridder, 1990; Wilson, 2005). $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ is intrinsically linked to the test duration (t_{f}), the well radius (r_{w}), as well as other parameters controlling the produced drawdown, while being theoretically independent of Q, provided that the well exhibits no well losses (i.e. is 100 % efficient).

Figure 14 sketches an idealized representation of the drawdown in and around a pumped well at the end of a SC test conducted in a confined aquifer of practically infinite lateral extent bounded by equally extensive aquitards acting as impermeable (nonleaky) barriers at its top and bottom. The ideal pumping well illustrated here fully penetrates the aquifer —it is either open-hole or screened over the entire thickness of the aquifer, while a casing isolates it from the overlying aquitard section— so that groundwater flow towards the well is essentially horizontal. The important length of the open section of the pumped well further highlights that the actual transmissivity (T^*) effectively controlling drawdown in the pumped well is not a point property (as is K) but rather a depth-integrated property. Therefore, T^* may also be dependent on the length and position of the open section of the control well within the aquifer, especially in non-ideal settings where the aquifer is heterogeneous and is tested with partially penetrating wells (as is the case most of the time in practice). Hence the bracket relating T^* and S to the open borehole section in the sketch.

Figure 14 further illustrates the set of primary and additional parameters which should be used to document such a test in preparation for T(SC) estimation. The primary parameters are the pumping rate (Q), the test duration (t_{f}), the final drawdown in the pumped well at the end of the test ($s_{\mathrm{w.f}}$), the well radius (r_{w}), and the aquifer storativity (S). Q, t_{f}, and r_{w}, are usually reported as is, while S commonly has to be inferred from ancillary data or a priori knowledge about the local confining conditions of the tested aquifer, as field estimates of S are rarely available (Papadopulos & Cooper, 1967; Bradbury & Rothschild, 1985). If $s_{\mathrm{w.f}}$ is not reported directly, it can be calculated simply from the difference between reported dynamic and static water levels, that is: $s_{\mathrm{w.f}} \stackrel{\mathrm{def}}{=} z_{\mathrm{dyn}} - z_{\mathrm{stat}}$. Moreover, although specific capacity is, by definition, the ratio $Q/s_{\mathrm{w.f}}$, it is nonetheless recommended to have Q and $s_{\mathrm{w.f}}$ data available separately rather than only as a ratio, in particular because Q is needed for explicit evaluation of the volume of groundwater pumped during the test ($= Q \cdot t_{\mathrm{f}}$; used in Equation 11, Section 3.3), the utility of which is demonstrated later in this study.

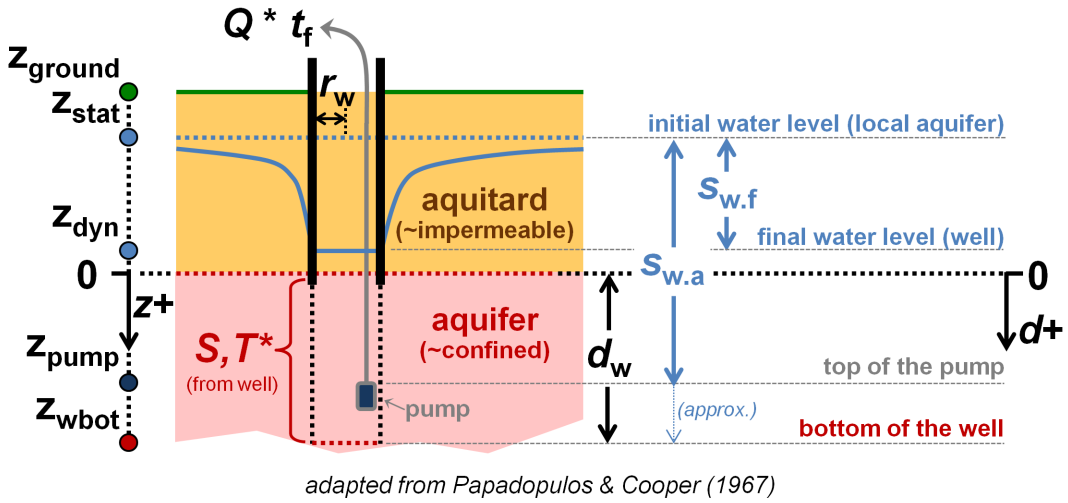


Figure 14: Schematic representation of the drawdown in and around a pumped well at the end of a specific capacity test conducted in an ideal nonleaky confined aquifer (adapted from Papadopulos & Cooper, 1967).

The additional parameters relevant to the methodology used in this study chiefly consist of the following two derived variables. The first, available drawdown in the pumped well ($s_{\mathrm{w.a}}$), is defined as the height of the water column above the pump in the well at test start, that is: $s_{\mathrm{w.a}} \stackrel{\mathrm{def}}{=} z_{\mathrm{pump}} - z_{\mathrm{stat}}$. But since such details concerning the precise location of the pump are rarely available, it is stipulated in this study that the pump is near the bottom of the well ($z_{\mathrm{pump}} \sim z_{\mathrm{wbot}}$), and thus: $s_{\mathrm{w.a}} \cong z_{\mathrm{wbot}} - z_{\mathrm{stat}}$. The second parameter, well depth in the tested aquifer (d_{w}), is defined as the vertical distance between the bottom of the well (z_{wbot}) and the local top of the tested aquifer (0 m by definition), that is: $d_{\mathrm{w}} \stackrel{\mathrm{def}}{=} z_{\mathrm{wbot}}$.

Since the additional parameters are used together with the primary parameters for interpretation and spatialization of a SC test, they are, as a whole, referred to as “SC data” in the text. Differently, the more restrictive term “(SC) test parameters” refers exclusively to the four primary parameters that can be determined prior to the start of the test: Q, t_{f}, r_{w}, and S.

The literature provides various analytical solutions for predicting the drawdown induced in the pumped well and/or in the aquifer during a pumping test, under diverse well and aquifer conditions, and pumping scenarios. For the particular purpose of exploiting SC data from SC tests (i.e. short-duration constant-rate single-well pumping tests), this study focuses on two solutions for the transient drawdown in the pumped well: the Theis solution (Theis, 1935) and the Papadopulos-Cooper solution (Papadopulos & Cooper, 1967), on the basis of which the two corresponding

T(SC) estimation methods are defined (Sections 3.2 and 3.3). The key reason behind the choice of the Papadopulos-Cooper solution is that it allows to accounts for wellbore storage without requiring any additional parameter compared to the Theis solution.

In order to meet the objectives of the study, the two solutions are continuously compared throughout the paper, in terms of their fundamental characteristics, of derived drawdown predictions, of T(SC) estimates, and of other criteria, while the uncertainties pertaining to each of the two T(SC) estimation methods are assessed through in-depth comparison of transmissivity estimates (symbolized as T: *without asterisk*) against the actual transmissivities (T^*: *with an asterisk*), notably through calculation of T/T^* ratios.

3.2 Conventional method for T(SC) estimation, based on the Theis solution

The conventional method for estimating T from SC data uses an analytical method based on the Theis nonequilibrium equation, as originally proposed by Theis *et al.* (1963). The Theis nonequilibrium equation (Theis, 1935) relates the drawdown s (observed in the aquifer at distance r and time t) induced by pumping a well at a constant discharge rate Q in a confined radially-symmetric aquifer (Equation 7a):

$$s(r,t) = \frac{Q}{4\pi T^*} W(u); \quad W(u) = -\mathrm{Ei}(u); \quad u = \frac{r^2 S}{4T^* t} \tag{7a}$$

$$s(r,t)_{\mathrm{CJ}} \approx \frac{Q}{4\pi T^*} \ln\left(\frac{2.25\, T^* t}{r^2 S}\right) \tag{7b}$$

where r is the radial distance of the observation point from the pumping well, t is the relative time since start of pumping, s is the theoretical drawdown (tied to distance r and time t), Q is the steady pumping rate, T^* is the aquifer transmissivity, S is the aquifer storativity, and $W(u)$ is the Theis well function —which is in fact the negative of the exponential integral of u. In most cases, however, it is the Cooper-Jacob (CJ) late-time approximation of the Theis solution that is used instead (Equation 7b), as it provides sufficient precision (see Figure 15a in Section 3.5), while being easier to calculate (Cooper & Jacob, 1946).

There are many assumptions underlying the Theis solution and its Cooper-Jacob approximation, notably concerning the aquifer (homogeneous, isotropic, horizontal, of uniform thickness, laterally extensive, tightly confined, remains fully saturated), the pumping well (vertical, fully penetrating the aquifer, constant discharge rate, 100 % efficient i.e. no well losses, infinitesimal diameter → negligible wellbore storage), and the CJ approximation formula itself (small value of u) (Kruseman & de Ridder, 1990; ASTM, 2005; Duffield, 2016b).

Since SC tests are single-well tests in which the drawdown is monitored in the pumped well only rather than in distant observation wells (where the effect of wellbore storage could often be neglected), assuming an infinitesimal diameter for the pumped well first seems a major hindrance to the use of the Theis solution for interpretation of SC tests. However, there is a frequently used yet imperfect workaround for this problem: it consists in approximating the drawdown in the well (s_w) from the theoretical drawdown at a radial distance (still from the center of the pumping well) equal to the well screen —or open hole— radius (r_w), calculated using Equation 7b. Hence the Theis-based Cooper-Jacob general approximation solution for the drawdown in the well at time t: $s_\mathrm{w}(t)_\mathrm{Tb} \cong s(r = r_\mathrm{w}, t)_\mathrm{CJ}$.

Thus, the forward problem of calculating expected *final* drawdown in the well at the end of a SC test ($s_\mathrm{w.f}$) for specified transmissivity (T^*) and test parameters may be tackled with the following Theis-based approximation formula from Cooper & Jacob (1946):

$$s_\mathrm{w.f}(T^*, Q, t_\mathrm{f}, r_\mathrm{w}, S)_\mathrm{Tb} \cong \frac{Q}{4\pi T^*} \ln\left(\frac{2.25\, T^* t_\mathrm{f}}{{r_\mathrm{w}}^2 S}\right) \tag{8}$$

Transmissivity can be estimated from SC data by solving the inverse problem, i.e. $T = T_\mathrm{est}(s_\mathrm{w.f}, \dots)_\mathrm{Tb}$. Technically, this consists in finding the optimal T_opt value that minimizes the following reformulation of the above equation as a log-transformed residual, while the five input parameters are fixed based on the SC data:

$$T_\mathrm{est}(s_\mathrm{w.f}, Q, t_\mathrm{f}, r_\mathrm{w}, S)_\mathrm{Tb} = \min_{T_\mathrm{opt}} \left\| \log(T_\mathrm{opt}) - \log\left[\frac{Q/s_\mathrm{w.f}}{4\pi} \ln\left(\frac{2.25\, T_\mathrm{opt} t_\mathrm{f}}{{r_\mathrm{w}}^2 S}\right)\right] \right\|_n \tag{9}$$

The iterative solution method proposed by Bradbury & Rothschild (1985), involving $\ell 1$-norm minimization (n = 1) of the untransformed residual, has been a quite popular procedure for inferring

T(SC). Yet, instead, we recommend solving Equation 9, which minimizes the squared log-transformed residual (via $\ell 2$-norm: n = 2) because this formulation provides a smooth convex function that facilitates convergence. More details on the proposed optimization algorithm for Theis-based computation of T(SC) estimates can be found directly in the R codes provided in Annexe A6.4.

In the conventional (Theis-based) method, it is inherently presumed that all assumptions related to the Theis and Cooper-Jacob solutions are reasonably well satisfied, and thus that T estimates can readily be exploited through statistical analyses to make inferences about the actual variability of T throughout the tested aquifer. However, we will later demonstrate that, in practice, the Theis-based estimation method has significant limitations.

3.3 New method for T(SC) estimation, based on the Papadopulos-Cooper solution

In order to overcome the limitation of the Theis-based estimation method regarding wellbore storage, an alternative analytical method was developed for estimating T from SC data which accounts for the wellbore storage effect. This method is based on the Papadopulos-Cooper (PC) solution "for the drawdown in a large-diameter well discharging at a constant rate from a homogeneous isotropic artesian aquifer, which also takes into consideration the water derived from storage within the well" (Papadopulos & Cooper, 1967, p. 241). Most of the assumptions underlying the PC solution are common with those of the Theis/Cooper-Jacob solution, except for the following key differences: the PC solution assumes neither that the pumped well has an infinitesimal diameter, that wellbore storage is negligible, nor that the u value is small. Thus, by implicitly considering the flatness of the water level within the pumped well of *finite* diameter in its mathematical formulation, the PC solution provides a more realistic prediction of early-time aquifer response to pumping near and inside the pumped well, compared to the Theis solution.

Although Papadopulos & Cooper (1967) also propose a general formula to predict the drawdown in the aquifer, this study focuses on the simpler formula they provide specifically to predict the drawdown inside the pumped well, which is therefore particularly well suited for SC test analysis:

$$s_{\mathrm{w}}(t)_{\mathrm{PC}} = \frac{Q}{4\pi T^*} F(u_{\mathrm{w}}, \alpha); \quad u_{\mathrm{w}} = \frac{{r_{\mathrm{w}}}^2 S}{4T^* t}; \quad \alpha = \frac{{r_{\mathrm{w}}}^2 S}{{r_{\mathrm{c}}}^2} \cong S \tag{10}$$

where $F(u_{\mathrm{w}}, \alpha)$ is an enhancement of $W(u)$ (i.e. the Theis well function) for dealing with a finite-

diameter pumping well, and r_c is the "radius of well casing in the interval over which the water level declines" during the pumping, while other variables have the same role and definition as in Equation 7. Note, however, that we slightly simplified the original formulation by assuming a uniform radius for the entire well ($r_c \approx r_w$), so that from here on, r_w is used instead of r_c, and α is thus considered equivalent to S. In this guise, the PC solution does not involve any additional input variables compared to the Theis solution.

As explained by Papadopulos & Cooper (1967), the theoretical drawdown in the pumped well (s_w) predicted by their solution (using Equation 10) will never exceed the theoretical maximum possible drawdown in the pumped well ($s_{w.max}$), i.e. the drawdown that would occur if "all the water pumped was derived from storage within the well", at any time t (Equation 11). In this regard, note that there is a typographical error in the original equation provided by the authors in the cited paper: transmissivity (T) was used by mistake instead of time (t). The correct equation to calculate $s_{w.max}$ for any given time t is:

$$s_w(t)_{PC} < s_{w.max}(t) \overset{def}{\equiv} \frac{Q}{4\pi T^*}\left(\frac{\alpha}{u_w}\right) = \frac{Qt}{\pi {r_w}^2} \left(\equiv \frac{\text{cumulative discharge } (t)}{\text{area of well casing}} \right) \quad (11)$$

Thus, the forward problem for calculating expected final drawdown in the well at the end of a SC test ($s_{w.f}$) for specified transmissivity (T^*) and test parameters, is expressed by the following PC-based formula:

$$s_{w.f}(T^*, Q, t_f, r_w, S)_{PCb} = \frac{Q}{4\pi T^*} F\left(u_w = \frac{{r_w}^2 S}{4T^* t_f}, \alpha = S\right) \quad (12)$$

Transmissivity can be estimated from SC data by solving the following inverse problem $T = T_{est}(s_{w.f}, \dots)_{PCb}$, in the same way as in Equation 9 but now based on the PC solution:

$$T_{est}(s_{w.f}, Q, t_f, r_w, S)_{PCb} = \min_{T_{opt}} \left\| \log(T_{opt}) - \log\left[\frac{Q/s_{w.f}}{4\pi} F\left(u_w = \frac{{r_w}^2 S}{4T_{opt} t_f}, \alpha = S\right)\right] \right\|_{n=2} \quad (13)$$

This new inverse problem, however, is more difficult to solve due to the inherent complexity of the $F(u_w, \alpha)$ function. More details on the proposed optimization algorithm for PC-based computation of T(SC) estimates can be found directly in the R codes provided in Annexe A6.4.

3.4 Dimensionless ratios used as diagnostic tools

The four dimensionless ratios which are defined hereafter serve as diagnostic tools mainly for comparing the performance of the Theis-based versus PC-based forward and inverse solutions. They facilitate and clarify the quantitative comparisons, while also opening interesting avenues in terms of finding general indicators (through the determination of threshold criteria) for gauging the expected reliability of T(SC) estimates whatever the SC test parameters.

The first proposed dimensionless ratio is directly inspired from a criterion originally formulated by Papadopulos & Cooper (1967) to determine if the wellbore storage effect is negligible, and thus if the PC solution for drawdown in the pumped well can be closely approximated by the Theis solution (Equation 14a). It corresponds to the ratio used in that criterion, u_{w}/α, which offers an interesting potential for generalization (Equation 14b). However, an *actual* T^* value is required for its calculation (in addition to t_{f} and r_{w}), which can be an impediment to its use in practice.

$$F(u_{\mathrm{w}},\alpha) \cong W(u_{\mathrm{w}}) \text{ if and only if } (u_{\mathrm{w}}/\alpha) < 10^{-3} \tag{14a}$$

$$(u_{\mathrm{w}}/\alpha)(T^*, t_{\mathrm{f}}, r_{\mathrm{w}}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{{r_{\mathrm{w}}}^2}{4T^* t_{\mathrm{f}}} \implies T^* > (u_{\mathrm{w}}/\alpha)^{-1}\frac{{r_{\mathrm{w}}}^2}{4t_{\mathrm{f}}} \tag{14b}$$

Additionally, two conditions of similarity between PC and Theis solutions are defined here for later use, based on this dimensionless ratio. They are formulated by first fixing maximum threshold values for u_{w}/α (as done in Equation 14a), and then translating into equivalent inequations for T^* (Equation 14b):

- condition ‘c1’ is the original condition proposed by Papadopulos & Cooper (1967): $(u_{\mathrm{w}}/\alpha) < 10^{-3} \Longrightarrow T^*_{\mathrm{c1}} > 10^3\,{r_{\mathrm{w}}}^2/(4\,t_{\mathrm{f}})$;
- condition ‘c2’ is an alternative, less restrictive condition that is proposed for testing in the present study: $(u_{\mathrm{w}}/\alpha) < 0.02 \Longrightarrow T^*_{\mathrm{c2}} > 50\,{r_{\mathrm{w}}}^2/(4\,t_{\mathrm{f}})$.

The second proposed dimensionless ratio is directly related to the first. The $s_{\mathrm{Tb}}/s_{\mathrm{PCb}}$ ratio (Equation 15) indeed gives an explicit measure of the deviation of $s_{\mathrm{w.f}}$ predictions by the Theis-based (approximation) forward solution versus the PC-based forward solution, for specified transmissivity (T^*) and SC test parameters (except Q which is not required).

$$(s_{\mathrm{Tb}}/s_{\mathrm{PCb}})(T^*, t_{\mathrm{f}}, r_{\mathrm{w}}, S) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{s_{\mathrm{w.f}}(T^*, \dots)_{\mathrm{Tb}}}{s_{\mathrm{w.f}}(T^*, \dots)_{\mathrm{PCb}}} = \frac{\ln\left(\frac{2.25\, T^* t_{\mathrm{f}}}{{r_{\mathrm{w}}}^2 S}\right)}{F\left(u_{\mathrm{w}} = \frac{{r_{\mathrm{w}}}^2 S}{4T^* t_{\mathrm{f}}}, \alpha = S\right)} \tag{15}$$

The third proposed dimensionless ratio is indirectly related to the previous two and is, so to speak, the reciprocal of the second ratio. It is defined as the theoretical ratio of the Theis-based estimate to the PC-based estimate, for specified final drawdown ($s_{\mathrm{w.f}}{}^*$) and SC test parameters, this time including Q (Equation 16). This third ratio is especially interesting in that it is more closely linked to the main purpose of this study, that is, the comparative assessment of the accuracy of the two T(SC) estimation methods. Moreover, it is readily usable in practice, since its formula does not require an input T^*, but uses only normal SC data.

$$(T_{\mathrm{Tb}}/T_{\mathrm{PCb}})(s_{\mathrm{w.f}}{}^*, Q, t_{\mathrm{f}}, r_{\mathrm{w}}, S) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{T_{\mathrm{w}}(s_{\mathrm{w.f}} = {s_{\mathrm{w.f}}}^*, \dots)_{\mathrm{Tb}}}{T_{\mathrm{w}}(s_{\mathrm{w.f}} = {s_{\mathrm{w.f}}}^*, \dots)_{\mathrm{PCb}}} \tag{16}$$

The fourth and last dimensionless ratio is a new proposed diagnostic tool for assessing (by quantifying) the significance of the wellbore storage effect in a SC test, based on equations of Section 3.3. This new concept of "wellbore storage contribution ratio" (ws_{cr}) is defined as the ratio between current and maximum possible drawdown in the well at some given time. Equation 17a gives the general formula for the calculation of the exact theoretical ratio (ws_{cr}^*) for specified transmissivity (T^*), time (t^*) and other SC test parameters; it is based on the PC solution (Equations 10 and 11). Interestingly, the right-hand side of the equation no longer requires Q. Equation 17b offers an alternative, more practical formulation using *measured* final drawdown in the well ($s_{\mathrm{w.f}}$) —instead of calculated final drawdown— as the numerator. This fourth dimensionless ratio, with its alternative practical formulation (Equation 17b), thus appears advantageous over the first two ratios, as its calculation does not require T^*, in addition to having an intuitive meaning.

$$ws_{\mathrm{cr}}^*(T^*, \cancel{Q}, t^*, r_{\mathrm{w}}, S) = \frac{s_{\mathrm{w}}(t = t^*, T_{\mathrm{w}} = T^*, \dots)_{\mathrm{PC}}}{s_{\mathrm{w.max}}(t = t^*)} = F(u_{\mathrm{w}}, \alpha)\left(\frac{u_{\mathrm{w}}}{\alpha}\right) \tag{17a}$$

$$ws_{\mathrm{cr}}(s_{\mathrm{w.f}}, Q, t_{\mathrm{f}}, r_{\mathrm{w}}) = \frac{s_{\mathrm{w.f}}}{s_{\mathrm{w.max}}(t = t_{\mathrm{f}})} = \frac{s_{\mathrm{w.f}}\,\pi {r_{\mathrm{w}}}^2}{Q t_{\mathrm{f}}} \tag{17b}$$

Furthermore, it is important to stress that for the first two dimensionless ratios, which depend notably on T^*, the value to use as input for this argument should in theory be the exact actual transmissivity at the well. However, since the actual T^* is a priori unknown, the estimated T may be used instead, but only if its reliability is confirmed. The problem is that, in practice, SC data are unavoidably imperfect (i.e. affected by errors) and thus, T estimates frequently deviate from actual T^* values, thereby impairing their reliability (as will be shown later in this study, Section 5). Accordingly, the first two ratios (u_{w}/α and $s_{\mathrm{Tb}}/s_{\mathrm{PCb}}$) may be evaluated only for SC-test inversions which resulted in T estimates confirmed as quantitatively reliable. On the contrary, the last two ratios may be evaluated for all SC tests, in practice, which is a clear advantage.

3.5 Dimensionless solutions and type curves

Before testing the forward and inverse solutions with representative input parameters, it is worth taking a look at the dimensionless outputs of the two well functions (W and F). This inspection should reveal if there are limits to the input arguments beyond which the solution output is no longer physically possible, while also allowing the assessment of the ranges within which both general solutions are similar.

To produce the graphs in Figure 15, a very wide range of u_{w} values, as well as seven values of α (listed in the legend of Figure 15b), were considered. Note that, in this non-dimensional context, u and u_{w} are effectively identical (see Equations 7 and 10), so that u_{w} can be used as the main input argument equally for both well functions. Note also that the type curves are not plotted as a function $1/u_{\mathrm{w}}$ —as is commonly done notably when presenting the Theis type curve $W(u)$ graphically— but rather as a function of u_{w}/α (or u_{w}) so as to mimic the layout that was used by Papadopulos & Cooper (1967) for plotting their original $F(u_{\mathrm{w}}, \alpha)$ type curves.

Figure 15a shows, in the foreground, the single type curve of the Theis exact solution, plotted using computed $W(u \equiv u_{\mathrm{w}})$ values versus u_{w} values, and the single type curve of its Cooper-Jacob approximation, plotted using the formula $\ln\left(\frac{2.25\,Tt}{r^2 S} \equiv \frac{2.25}{4} u_{\mathrm{w}}^{-1}\right)$ as a substitute for computing

W-like values. In the background, the graph shows the type curves of the Papadopulos-Cooper (PC) solution for the prescribed α values, plotted using computed $F(u_w, \alpha)$ values versus u_w values. Note that this graph as a whole is in fact almost identical to that in the original paper (Papadopulos & Cooper, 1967, their Fig. 2), although new insightful elements of interpretation are provided here.

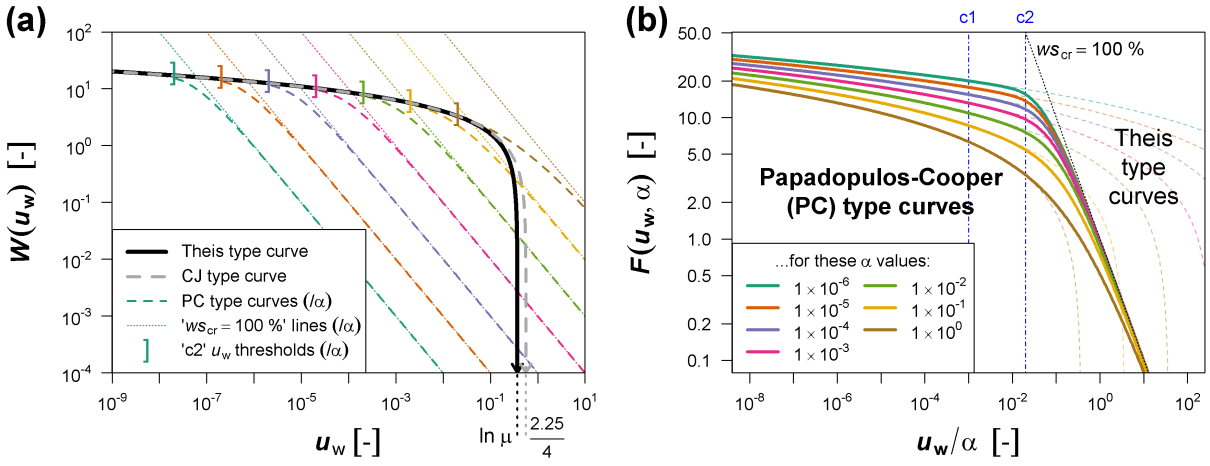


Figure 15: Calculated type curves for a wide range of dimensionless inputs, using the two well functions, $W(u \equiv u_w)$ of the Theis solution, and $F(u_w, \alpha)$ of the Papadopulos-Cooper (PC) solution. The calculated values are plotted against: (a) u_w (Theis as a thick solid black curve, Cooper-Jacob as a thick dashed gray curve, and PC as dashed colored curves) (layout after "Fig. 2" from Papadopulos & Cooper, 1967); (b) u_w/α (PC as thick solid colored curves, and Theis as thin dashed colored curves). Complementary features are drawn in addition to the type curves: 'ws_{cr} = 100 %' limit lines illustrating the extreme scenario of zero contribution from aquifer storage (as thin dotted straight lines; one line per value of α in the left graph); positions of the u_w/α maximum thresholds defining conditions c1 and c2 (as colored right square brackets ']' placed at $u_w = u_w/\alpha * \alpha$ for c2 only, in the left graph; and as two blue vertical dash-dot lines, for c1 and c2, in the right graph); positions of the u_w ultimate/highest thresholds beyond which either the Theis well function or its Cooper-Jacob approximation equals zero (as two long dotted ticks below the X axis of the left graph; labels express their exact value). Note that these type curves are generic, and that it can often be assumed that the pumped well has an uniform radius ($r_c \approx r_w$) so that $\alpha \approx S$.

A first observation in Figure 15a is that the Theis type curve $W(u_w)$ plunges towards 0.0 at the highest u_w values. Indeed, there is an "ultimate" threshold value for u_w at which $W(u_w)$ = 0.0, and beyond which $W(u_w)$ < 0.0 —though negative $W(u_w)$ values are not represented in the graph due to the use of a log scale for the Y axis. Actually, the u_w value of this threshold corresponds exactly to the natural logarithm of the Soldner constant: $\ln \mu$ = 0.3725074… (OEIS Foundation Inc., 2017; Weisstein, 2017). Thus, considering the fact that all input parameters of the exact Theis solution (Equation 7a) are by definition positive values, and that predicted drawdowns must obviously be

of the same sign as the pumping rate, $W(u_w) < 0.0$ is indeed an entirely unacceptable range of results. Therefore, $\ln \mu$ (≈ 0.3725) is definitely the ultimate/highest threshold value for u_w, when using the exact Theis solution. Alternatively, with the Cooper-Jacob approximation of the Theis solution, 2.25 / 4 (= 0.5625) is the ultimate/highest threshold value for u_w, beyond which $\ln(2.25/4 \cdot u_w^{-1}) < 0.0$. These two ultimate u_w thresholds (indicated by specially labeled long ticks added to the X axis of the graph) are indeed approached by their corresponding type curve, as predicted.

Moreover, all of the PC type curves in Figure 15a consist of a first part coinciding with the Theis type curve, and a second part departing from the Theis curve towards a common log-log slope. The first part (lower u_w values) corresponds to conditions where the wellbore storage effect is negligible, whereas the second part (higher u_w values) corresponds to conditions where this effect is dominant (i.e. $ws_{cr} \rightarrow 100$ %). The colored right square brackets (']') indicate the breaking points at which each PC type curve starts to deviate from the Theis type curve. The location of these breakpoints was determined using condition c2 threshold, $u_w/\alpha = 0.02$ (as defined in Section 3.4), from which u_w coordinates were simply obtained from 0.02 × α.

Figure 15b shows the same data, but now with an alternative definition for the X axis. In the foreground, the PC type curves are plotted using computed $F(u_w/\alpha * \alpha, \alpha)$ values against u_w/α values. In the background, one variant of the Theis type curve is plotted for each different value of α, using computed $W(u_w/\alpha * \alpha)$ values also against u_w/α values. This alternative representation reveals patterns which were not obvious in Figure 15a. Firstly, all of the PC type curves tend towards one single limit line for high values of u_w/α, which actually corresponds to the $ws_{cr} = 100$ % extreme scenario (hence the label 'ws_{cr} = 100 %' for that line). Secondly, the deviations between the Theis curves and the PC curves, now more apparent, confirm the suitability of conditions c1 and c2: deviations are indeed negligible (<0.2 %) below the c1 threshold, and practically negligible (<10.0 %) below the c2 threshold. Simple calculations further show that these deviations augment as α decreases, i.e. as the contribution of wellbore storage becomes increasingly dominant over that of aquifer storage. Furthermore, this exercise confirms that the 'ws_{cr} = 100 %' straight line(s) asymptotically approached by the PC type curves when u_w or u_w/α is large, can be fully described by the following formula derived from Equation 11: $Y = F(u_w, \alpha) = (u_w/\alpha)^{-1}$; a theoretical yet interesting finding.

3.6 Explanatory example of the forward and inverse solutions

To get a better sense of how the forward and inverse solutions of behind both estimation methods behave, especially when the wellbore storage effect becomes important, the following graphs were generated using values presented in Table 4 as the constant SC test parameters when necessary. Note, though, that the following results describe the theoretical relationship between exact transmissivity (T^*) and theoretical final drawdown in the pumped well ($s_{\mathrm{w.f}}$) under *ideal* test conditions where all assumptions behind the pumping test solutions are fully met and the SC test parameters are exactly known (i.e. error-free).

Table 4: Typical specific-capacity test parameters used in the theoretical part of this study (based on mode values for these parameters from the case-study regional database, see Table 12).

SC test parameter (asterisk means "reference")	**Typical value** (used as reference value)
Q^* : pumping rate	22.7 L/min (6 US gpm)
t_{f}^* : test duration	60 min (1 hour)
r_{w}^* : well radius	0.0762 m (3 inches)
S^* : aquifer storativity	5×10^{-3} [-] (semi-confined)

To explore the forward solutions $s_{\mathrm{w.f}}(T^*, \dots)$, a wide range of $\log T^*$ values from -10 up to -2 are considered. Predictions from each solution for $s_{\mathrm{w.f}}$ are computed for the various T^* values — recalling that for the Theis-based forward solution, these drawdowns are in fact calculated using the Cooper-Jacob approximation of the Theis solution, and assuming that $s_{\mathrm{w}} \cong s(r = r_{\mathrm{w}})$. Maximum possible drawdown in the pumped well for the current test parameters is also calculated: $s_{\mathrm{w.max}} \approx 74.67$ m. The two conditions defined earlier, c1 and c2, are also considered.

Figure 16 presents the results graphically. Theis-based and PC-based forward solutions for $s_{\mathrm{w.f}}$ are drawn respectively as red and blue solid curves.

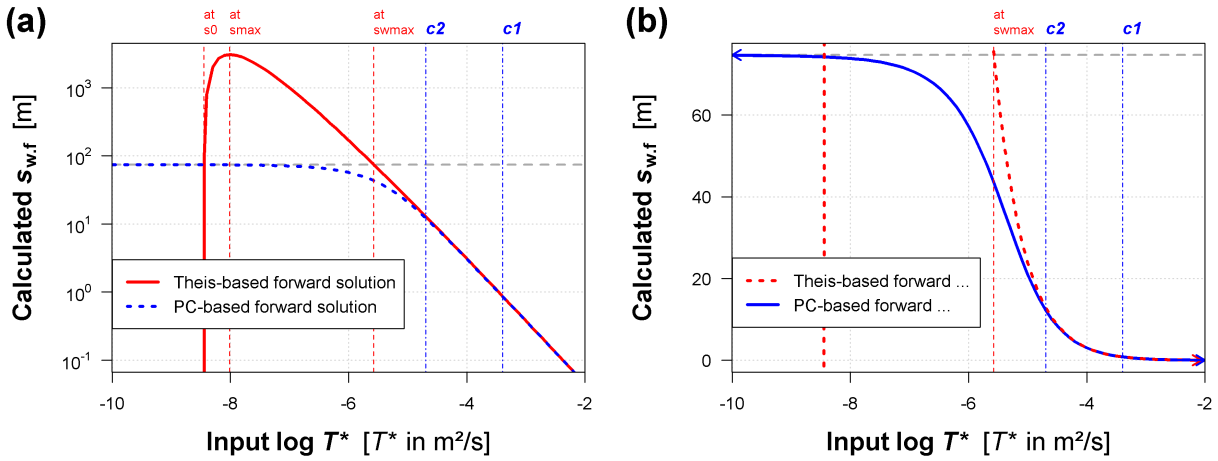


Figure 16: Calculated final drawdown in the well ($s_{w.f}$) for a wide range of "exact" transmissivities (T^*), using the Theis-based forward solution (red curve) or the Papadopulos-Cooper-based (PC-based) forward solution (blue curve), and the set of typical SC test parameters from Table 4: (a) log-log plot focusing on Theis-based predictions; (b) log-linear plot focusing on PC-based predictions. The light-gray dashed horizontal line indicates $s_{w.max}$, while the two blue dash-dot vertical lines locate T^* thresholds corresponding to conditions c1 and c2 (defined in Section 3.4).

Figure 16 shows that both forward solutions match very well within the portion respecting the less restrictive c2 condition (i.e. for $T^* > T^*_{c2}$), where 0.00 m < $s_{w.f}^{(Tb)} - s_{w.f}^{(PCb)}$ < 0.65 m. Farther below c2 (i.e. for $T^* \ll T^*_{c2}$), PC final drawdowns asymptotically approach $s_{w.max}$ as intuitively expected. This stresses the fact that the lower the transmissivity, the closer to 100 % the proportion of pumped water coming from wellbore storage rather than aquifer storage —as expressed through ws_{cr} (Equation 17).

Contrastingly, plotted Theis (Cooper-Jacob) final-drawdown predictions for low values of $\log T^*$ highlight the non-representative nature of that solution when u_w becomes high (Figure 16a). Not only do these drawdowns strongly deviate from the PC drawdowns soon beneath c2 (note the log scale of the Y axis), but they also exceed the maximum possible drawdown, $s_{w.max}$.

More precisely, Theis-based $s_{w.f}$ predictions increase considerably as $\log T^*$ decreases, crossing $s_{w.max}$ at $\log T^*_{swmax}$ (Equation 18a; indicated by a red dashed straight line labeled "at swmax" in the graph), and continuing until maximum is reached at $\log T^*_{smax}$ (Equation 18b; …"at smax" in the graph), at which point they start to decrease rapidly, crossing zero final drawdown at $\log T^*_{s0}$ (Equation 18c; …"at s0" in the graph), continuing thereafter with strongly negative values, further below $\log T^*_{s0}$. As a matter of fact, Theis-based $s_{w.f}$ predictions made for $\log T^* < \log T^*_{swmax}$ are all physically incoherent (since $s_{w.f} > s_{w.max}$ is impossible according to theory behind the PC solution), and thus should be systematically regarded as invalid.

Moreover, these results show that the Theis-based forward solution systematically overestimates $s_{\mathrm{w.f}}$, in virtually the whole range of $\log T^*$ values except close to and below the $\log T^*_{\mathrm{s0}}$ threshold.

$$T^*_{\mathrm{swmax}} = T_{\mathrm{est}}(s_{\mathrm{w.f}} = s_{\mathrm{w.max}}(\dots)\,, \dots)_{\mathrm{Tb}} \tag{18a}$$

$$T^*_{\mathrm{smax}} = e \cdot \left(\frac{2.25\ t_{\mathrm{f}}}{{r_{\mathrm{w}}}^2 S}\right)^{-1} \Longrightarrow \log T^*_{\mathrm{smax}} = \log e - \log\left(\frac{2.25\ t_{\mathrm{f}}}{{r_{\mathrm{w}}}^2 S}\right) \tag{18b}$$

$$T^*_{\mathrm{s0}} = \left(\frac{2.25\ t_{\mathrm{f}}}{{r_{\mathrm{w}}}^2 S}\right)^{-1} \Longrightarrow \log T^*_{\mathrm{s0}} = -\log\left(\frac{2.25\ t_{\mathrm{f}}}{{r_{\mathrm{w}}}^2 S}\right) \tag{18c}$$

Then, to explore the inverse solutions $T_{\mathrm{est}}(s_{\mathrm{w.f}}, \ldots)$, a range of $s_{\mathrm{w.f}}$ values from 0 % to 110 % of $s_{\mathrm{w.max}}$ are now considered. Transmissivity is estimated for each input $s_{\mathrm{w.f}}$ value, using either of the two inverse solutions and the set of typical SC test parameters from Table 4 (Figure 17).

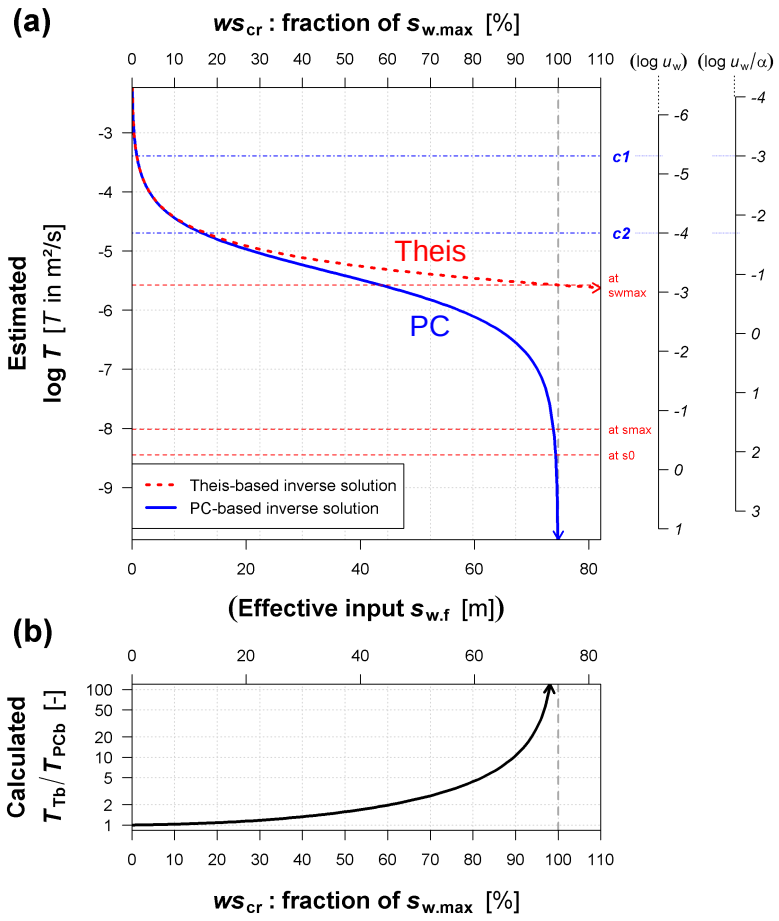


Figure 17: Estimated transmissivity ($\log T$) as a function of final drawdown in the pumped well ($s_{\mathrm{w.f}}$), using either Theis-based (dashed red curve) or Papadopulos-Cooper-based (solid blue curve) inverse solution, along with the set of typical SC test parameters from Table 4: (a) main results; (b) deviations of Theis-based vs. PC-based estimates, calculated from the main results using the third dimensionless ratio. The straight lines have the same meaning as in the presentation of the forward results (in Figure 16).

Figure 17a presents the main results. Estimated $\log T$ values, obtained using either the Theis-based or PC-based inverse solutions, are drawn, respectively as a dashed red curve and a solid blue curve. As expected, the contents of this log-linear graph are the exact inverse of that of Figure 16b. Here again, the sigmoid shape of the PC-based results shows the asymptotic behavior of the PC solution as $s_{\mathrm{w.f}}$ approaches one of the two following limits: i) for very small final

drawdowns, $T_{\mathrm{est}}(s_{\mathrm{w.f}} \to 0)_{\mathrm{PCb}} \to \infty$; ii) for large final drawdowns approaching maximum possible drawdown, $T_{\mathrm{est}}(s_{\mathrm{w.f}} \to s_{\mathrm{w.max}})_{\mathrm{PCb}} \to 0$. Moreover, both curves match very well only for the higher $\log T$ values, that is, near the "$s_{\mathrm{w.f}} \to 0$" asymptote. Indeed, below c2, the Theis-based results start to deviate increasingly from the PC-based results —considered here as the "true" (or at least better) relationship between $\log T$ and $s_{\mathrm{w.f}}$ since it accounts for the wellbore storage effect— even crossing the second limit (at $s_{\mathrm{w.f}} = s_{\mathrm{w.max}}$, $\log T = \log T^{*}_{\mathrm{swmax}}$) as if it did not exist.

Figure 17b facilitates the interpretation of these results by quantifying the discrepancy of the Theis-based estimates through the use of the $T_{\mathrm{Tb}}/T_{\mathrm{PCb}}$ dimensionless ratio (defined in Section 3.4). This complementary graph, based on theoretical error-free results, *suggests* that the Theis-based inverse solution offers comparable performances for estimating T^{*} from SC tests ending with a final drawdown less than ~50–80 % of the calculated $s_{\mathrm{w.max}}$ (depending on the desired accuracy target for T), while at higher ws_{cr} approaching 100 %, the discrepancy becomes clearly unacceptable, with $T_{\mathrm{Tb}} > 10 \cdot T_{\mathrm{PCb}}$.

Figure 17 as a whole thus shows that the Theis-based inverse solution is clearly unfit for estimating the actual transmissivity when the input final drawdown in the inverse solution closely approaches or exceeds the *calculated* maximum possible drawdown, and that in any case it will overestimate transmissivity compared to the PC-based inverse solution. Nonetheless, results also show that the Theis-based inverse solution remains a viable option for obtaining reliable physically-consistent T(SC) estimates, as long as the wellbore storage effect is small (e.g. ws_{cr} < 50 %), for instance due to the small radius of the pumped well, or to the large duration of the SC test. Furthermore, results confirm that the PC-based estimation method does not provide any solution when $s_{\mathrm{w.f}} > s_{\mathrm{w.max}}$. This is viewed as beneficial, since it immediately informs that the SC test, as it is reported, is in fact physically impossible. Thus, in such cases where $s_{\mathrm{w.f}} > s_{\mathrm{w.max}}$, the output estimated T value is described as "indeterminate", and stored as $\log T = -\infty$ whenever a numerical value is required (hence the abbreviation "-IND"). In a similar way, there are special circumstances where $s_{\mathrm{w.f}}$ is too small for the optimization algorithm to find a solution for $\log T$. In such cases, the output estimated T value is still described as "indeterminate", but rather stored as $\log T = +\infty$ whenever a numerical value is required (hence "+IND"). Conversely, the Theis-based inverse solution, inherently unaware of the $s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.max}}$ constraint, always provides seemingly "valid" estimates, thereby giving the false impression that all tests are physically plausible, which is clearly misleading.

In short, this example illustrates the adverse consequences of ignoring the wellbore storage effect, which have important implications in practice. Indeed, even if all assumptions inherent in the PC solution are met, the Theis-based inverse solution tends towards a systematic overestimation of actual transmissivity (T^*) when ws_{cr} is significant, that is, when T^* is low.

Furthermore, these first results show that condition c1 —originally formulated by Papadopulos & Cooper (1967)— is unnecessarily restrictive. Our proposed alternative condition c2 indeed looks more reasonable for gauging the domain within which the Theis-based inverse solution is a sufficiently close approximation of the PC-based inverse solution. In fact, these results suggest that even larger thresholds for u_{w}/α could be considered, depending of course on the desired accuracy for the Theis-based estimates.

3.7 Theoretical limit values for the input parameters of the T(SC) inverse solution

From the formulas for $s_{\mathrm{w.max}}$ (Equation 11) and ws_{cr} (Equation 17), and the consequent asymptotic behavior of the PC-based inverse solution observed in Figure 17a when $s_{\mathrm{w.f}} \rightarrow s_{\mathrm{w.max}}$, it becomes clear that there is also a minimum threshold value of specific capacity ($Q/s_{\mathrm{w.f}}$) below which there is no solution to the inverse problem. The limit $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ value for given values of r_{w} and t_{f} can indeed be calculated from Equation 19a. And from this latter equation, formulas can be derived for calculating the limit value for t_{f} (Equation 19b) or r_{w} (Equation 19c), still for given values of the other two parameters. These thresholds will be useful when interpreting the results of the sensitivity analysis (Section 4.2).

$$(Q/s_{\mathrm{w.f}})_{\mathrm{min}} = \frac{Q}{s_{\mathrm{w.max}}} = \frac{\cancel{Q}}{1} * \frac{\pi {r_{\mathrm{w}}}^2}{\cancel{Q} t_{\mathrm{f}}} = \frac{\pi {r_{\mathrm{w}}}^2}{t_{\mathrm{f}}} \tag{19a}$$

$$(t_{\mathrm{f}})_{\mathrm{min}} = \frac{\pi {r_{\mathrm{w}}}^2}{(Q/s_{\mathrm{w.f}})} \tag{19b}$$

$$(r_{\mathrm{w}})_{\mathrm{max}} = \left[\frac{t_{\mathrm{f}} * (Q/s_{\mathrm{w.f}})}{\pi}\right]^{1/2} \tag{19c}$$

3.8 Definition of a minimum estimable actual-T threshold based on available drawdown

The PC-based inverse solution can be used to calculate the theoretical minimum actual transmissivity (T^*) that can be estimated in a well of finite length and thus, of limited "available drawdown" ($s_{\mathrm{w.a}}$) —the latter concept referring to the height of the water column above the pump prior to the start of the test— for given SC test parameters. This original notion of "minimum estimable T^* threshold" (T^*_{me}; note the superscript asterisk which recalls that this threshold relates to actual T^*, not estimated T), thus, is defined by the following formula:

$$T^*_{\mathrm{me}}(s_{\mathrm{w.a}}, Q, t_{\mathrm{f}}, r_{\mathrm{w}}, S) = \begin{cases} T_{\mathrm{est}}(s_{\mathrm{w.f}} = s_{\mathrm{w.a}}, \dots)_{\mathrm{PCb}}, & s_{\mathrm{w.a}} < s_{\mathrm{w.max}}(\dots) \\ 0, & s_{\mathrm{w.a}} \geq s_{\mathrm{w.max}}(\dots) \end{cases} \quad (20)$$

Accordingly, actual transmissivity at the well (T^*) is "estimable" (i.e. can be estimated) only if it is above this threshold, i.e. if $T^* > T^*_{\mathrm{me}}(\dots)$. The accuracy of this inequality, however, will depend on the level of uncertainty in the SC test parameters, as well as on the degree to which the assumptions behind the PC solution are satisfied, in practice. To better explain the practical implications of this parameter-dependent threshold, a new graphical representation of the PC-based forward solution was prepared (Figure 18). Values from Table 4 were used again to set the constant SC test parameters, and arbitrary yet realistic values of "minimum measurable drawdown" ($s_{\mathrm{w.f.min}}$ = 0.1 m) and "minimum available drawdown" ($s_{\mathrm{w.a.min}}$ = 1.0 m) were considered, for this demonstration. The calculated maximum possible drawdown in the well for the considered set of SC test parameters is $s_{\mathrm{w.max}} \approx$ 74.67 m.

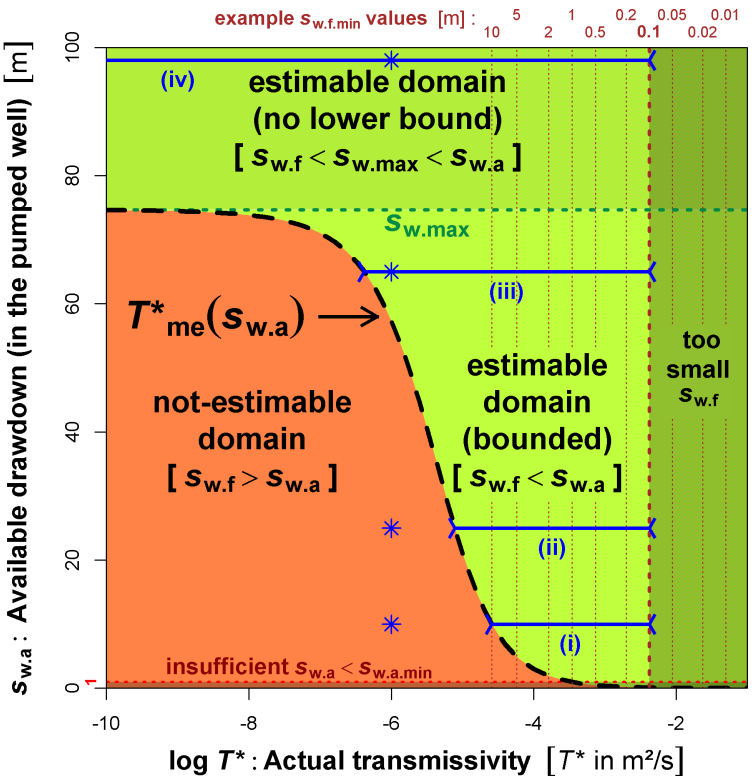


Figure 18: Graphical explanation of the minimum estimable actual-transmissivity threshold (T^*_{me}) concept, implemented to answer the question "Can the actual transmissivity (T^*) at the well be estimated in theory, using the set of typical specific-capacity test parameters from Table 4?". The parameter-dependent $T^*_{me}(s_{w.a})$ threshold is drawn as a thick dashed black curve. The domain of potentially estimable $T^* > T^*_{me}$ is colored in green tones, while the domain of non-estimable $T^* < T^*_{me}$ is colored in red tones. Underlying conditions for each domain are formulated in brackets. The maximum possible drawdown in the well for the current test parameters ($s_{w.max} \approx$ 74.67 m) is indicated by a horizontal dotted green line. The vertical dotted brown lines give examples of minimum measurable drawdown ($s_{w.f.min}$) values; they are positioned at T^* coordinates computed from Equation 13 using $s_{w.f.min}$ as the main input argument. The thick dotted brown line highlights the chosen value, $s_{w.f.min}$ = 0.1 m, for this demonstration. The horizontal dotted red line near the bottom of the graph indicates an example minimum available drawdown ($s_{w.a.min}$) value below which the available drawdown ($s_{w.a}$) is presumed insufficient i.e. too narrow for the successful estimation of any T^*. Finally, the blue features are visual aids for an easier understanding of the four examples identified by roman letters (from i to iv) in the text: the blue whiskers represent effectively estimable ranges, whereas the blue stars locate the arbitrarily chosen T^* value used for those four examples.

Graphical results of Figure 18 first show that the minimum estimable *actual*-transmissivity threshold (T^*_{me}) varies greatly as a function of the available drawdown ($s_{w.a}$). The variation of $T^*_{me}(s_{w.a})$ is strongly nonlinear, considering that the variation of the plotted log-transformed values already is. In particular, values of T^*_{me} for small $s_{w.a}$ are noticeably high. Moreover, Figure 18 highlights that there is a threshold value of $s_{w.a} = s_{w.max}$ (the horizontal dotted green line) above which any actual T^* should in theory be estimable, at least if $s_{w.f}$ could be measured with perfect

accuracy and there were no errors of any kind in the other input parameters. In addition, the shaded green area in the rightmost part of the graph underscores that the range of effectively estimable T^* for a given $s_{\mathrm{w.a}}$ also has an upper bound inherent to the limited practical feasibility of measuring very small final drawdowns in the well ($s_{\mathrm{w.f}} \geq s_{\mathrm{w.f.min}}$). This upper bound substantially reduces the extent of the prior *potentially* estimable T^* domain, even when the $s_{\mathrm{w.f.min}}$ constraint is small. It thus follows that a complementary "maximum estimable T^* threshold" (T^*_{mxe}), also dependent on the SC test parameters in addition to the constant $s_{\mathrm{w.f.min}}$, must be defined as well (Equation 21).

$$T^*_{\mathrm{mxe}}(s_{\mathrm{w.f.min}}, Q, t_{\mathrm{f}}, r_{\mathrm{w}}, S) = T_{\mathrm{est}}(s_{\mathrm{w.f}} = s_{\mathrm{w.f.min}}, \dots)_{\mathrm{PCb}} \tag{21}$$

Thus, the effective domain of theoretically estimable T^*, corresponding to the light green area of the graph in Figure 18, can be fully described by the following system of inequalities:

$$\begin{cases} s_{\mathrm{w.a}} \geq s_{\mathrm{w.a.min}} \\ T^*_{\mathrm{me}}(s_{\mathrm{w.a}}) < T^* \leq T^*_{\mathrm{mxe}} \end{cases} \tag{22}$$

Similarly, the concept of "theoretical estimable range" (TER) for T^* is defined as the interval [T^*_{me}, T^*_{mxe}], or [$\log T^*_{\mathrm{me}}$, $\log T^*_{\mathrm{mxe}}$], depending on the context. It is designated under the acronym "TER" in the text. Accordingly, if the minimum measurable drawdown constraint is voluntarily disregarded (by setting $s_{\mathrm{w.f.min}}$ = 0 m), the TER simplifies to the half-bounded interval [T^*_{me}, ∞], or [$\log T^*_{\mathrm{me}}$, $+\infty$].

On the basis of these latter concepts, a classification scheme is proposed for the SC tests. It is intended to provide useful qualitative information regarding the probable range for the *actual* transmissivity (T^*), by exploiting the concept of limited TER.

Table 5 presents the classification scheme in terms of the label, the definition (i.e. the condition for belonging to the class), and the implication (i.e. the ensuing qualitative information regarding $\log T^*$) for each of its four classes. First is the full scheme, appropriate when both the $s_{\mathrm{w.a.min}}$ and $s_{\mathrm{w.f.min}}$ constraints are active (i.e. > 0 m), and then is the simplified scheme, appropriate when the two constraints are inoperative (i.e. = 0 m).

Table 5: Scheme for classification of SC tests based on the concept of limited "theoretical estimable range" (TER) for actual transmissivity (T^*).

Class label	Condition(s) for belonging to the class	Implication in terms of prediction of the actual T^*
— full scheme — [use only if ($s_{\mathrm{w.a.min}}$ > 0 m) and/or ($s_{\mathrm{w.f.min}}$ > 0 m)]		
'< TER'	[($s_{\mathrm{w.f}} \rightarrow s_{\mathrm{w.a}}$) or ($s_{\mathrm{w.f}} > s_{\mathrm{w.a}}$)] and ($s_{\mathrm{w.a}} \geq s_{\mathrm{w.a.min}}$)	T^* is likely below the TER (i.e. $T^* < T^*_{\mathrm{me}}$)
'∈ TER'	($s_{\mathrm{w.f.min}} \leq s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.a}}$) and ($s_{\mathrm{w.a}} \geq s_{\mathrm{w.a.min}}$)	T^* is likely within the TER (i.e. $T^*_{\mathrm{me}} < T^* < T^*_{\mathrm{mxe}}$)
'> TER'	($s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.f.min}}$) and ($s_{\mathrm{w.a}} \geq s_{\mathrm{w.a.min}}$)	T^* is likely above the TER (i.e. $T^* > T^*_{\mathrm{mxe}}$)
'? vs. TER'	($s_{\mathrm{w.a}} < s_{\mathrm{w.a.min}}$)	available drawdown is insufficient for inferring anything about $\log T^*$
— simplified scheme (used in the case study) — [use only if ($s_{\mathrm{w.a.min}}$ = 0 m) and ($s_{\mathrm{w.f.min}}$ = 0 m)]		
'< TER'	($s_{\mathrm{w.f}} \rightarrow s_{\mathrm{w.a}}$) or ($s_{\mathrm{w.f}} > s_{\mathrm{w.a}}$)	T^* is likely below the TER (i.e. $T^* < T^*_{\mathrm{me}}$)
'∈ TER'	($s_{\mathrm{w.f.min}} \leq s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.a}}$)	T^* is likely within the TER (i.e. $T^* > T^*_{\mathrm{me}}$)

Interestingly, the conditions for belonging to either class of the schemes described in Table 5 involve only drawdown-related variables (and constants). Therefore, in practice, this classification will be readily applicable to all SC test results which have non-empty values for both $s_{\mathrm{w.f}}$ and $s_{\mathrm{w.a}}$. Of course, making (qualitative) inferences regarding T^* on the basis of the obtained classification will also require that the bounds of the TER (i.e. T^*_{me} and T^*_{mxe}) are computed for each SC test. Furthermore, it is important to mention that the constant constraints involved in the full scheme (i.e. $s_{\mathrm{w.a.min}}$ and $s_{\mathrm{w.f.min}}$) will in fact be of limited use when applied to actual SC datasets, due to the inherent uncertainties in the reported data. Accordingly, in practice, these two constraints may be canceled by setting their value to zero ($s_{\mathrm{w.a.min}}$ = 0 m; $s_{\mathrm{w.f.min}}$ = 0 m), so that all SC tests can then be classified more simply in either of the two classes of the simplified scheme described in the lower part of Table 5. Thus, in practice, a SC test belongs to the '< TER' class if ($s_{\mathrm{w.f}} \rightarrow s_{\mathrm{w.a}}$) or ($s_{\mathrm{w.f}} > s_{\mathrm{w.a}}$), else it belongs to the '∈ TER' class.

Four specific examples are now provided to demonstrate more clearly how the concepts of this section can be effectively applied. A “notional well” is considered, in which the exact yet a priori unknown *actual* transmissivity is $\log T^*$ = -6.00, and tested using the same set of SC test parameters as above, thus implying a calculated *theoretical* final drawdown of $s^*_{\mathrm{w.f}}$ = 57.3 m in absence of any $s_{\mathrm{w.a}}$ constraint. Note that the following examples are expressly illustrated as blue features in Figure 18 (see the figure legend for more details):

i. For an available drawdown of $s_{\mathrm{w.a}}$ = 10.0 m, the computed effective theoretical estimable range (TER) for $\log T^*$ is [$\log T^*_{\mathrm{me}}$ = -4.59, $\log T^*_{\mathrm{mxe}}$ = -2.38]. Due to this limited $s_{\mathrm{w.a}}$, the “real” drawdown in the well is constrained to stop at 10.0 m soon after the start of the test, so that measured final drawdown ($s_{\mathrm{w.f}}$) also is ~10.0 m. T(SC) estimation under this $s_{\mathrm{w.a}}$ constraint thus gives an *estimated* $\log T \approx \log T^*_{\mathrm{me}} \approx$ -4.59. Accordingly, from a practical perspective, the fact that $s_{\mathrm{w.f}} \rightarrow s_{\mathrm{w.a}}$ here implies that it is highly probable that $\log T^*$ < -4.59, and hence stresses that the $\log T$ estimate obtained should not be regarded as quantitatively reliable but rather as *qualitatively informative*. In short, this test belongs to the ‘< TER’ class from Table 5.

ii. For $s_{\mathrm{w.a}}$ = 25.0 m (i.e. ~33 % of $s_{\mathrm{w.max}}$), the effective TER is somewhat broader: [-5.11, -2.38], and the test ends with a constrained $s_{\mathrm{w.f}}$ ~ 25.0 m. Here again, $s_{\mathrm{w.f}} \rightarrow s_{\mathrm{w.a}}$, informing that $\log T^*$ < -5.11, while $\log T$ still cannot be regarded as quantitatively reliable. In short, this test also belongs again to the ‘< TER’ class from Table 5.

iii. For $s_{\mathrm{w.a}}$ = 65.0 m (i.e. ~87 % of $s_{\mathrm{w.max}}$), the effective TER is significantly greater: [-6.38, -2.38], and the test ends with $s_{\mathrm{w.f}}$ ~ 57.3 m, giving an estimated $\log T \approx$ -6.00. Since $s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.a}}$, the obtained $\log T$ estimate can thus be regarded as *quantitatively reliable*. This test belongs to the ‘∈ TER’ class from Table 5.

iv. Finally, for $s_{\mathrm{w.a}}$ = 98.0 m (or in fact any $s_{\mathrm{w.a}} > s_{\mathrm{w.max}}$), the effective estimable range is]-∞, -2.38], and the test ends with $s_{\mathrm{w.f}}$ ~ 57.3 m. This half-bounded interval indicates that it should —at least in theory— be possible to estimate the *actual* $\log T^*$ whatever the value, as long as it is less than -2.38. And since $s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.a}}$, the obtained $\log T$ estimate can thus be regarded as quantitatively reliable, as in the previous example (iii). This test also belongs to the ‘∈ TER’ class from Table 5.

All in all, these four examples illustrate the clear advantage of having a large $s_{\mathrm{w.a}}$ and, conversely, the severe limitation related to having a small $s_{\mathrm{w.a}}$, in terms of the potential quantitative reliability of T(SC) estimates. In particular, the examples highlight that only the SC tests ending with a measured final drawdown smaller than the initially available drawdown ($s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.a}}$) —i.e. the tests

belonging to the class '∈ TER' from Table 5— have the *potential* to be quantitatively reliable. These examples also confirm the efficacy of the classification scheme described in Table 5 for condensing the qualitative information regarding the actual T^*.

However, it is important to stress that an estimable range for T^* obtained from Equation 22 is in fact only a *theoretical* estimable range (TER) for T^*, as it is calculated based on exact parameter values not accounting for uncertainties in the input SC data. Specifically, obtaining an estimated $\log T$ lying inside the TER for T^* is therefore not a sufficient condition for concluding that a specific T(SC) estimate is actually quantitatively reliable. Likewise, meeting the condition $s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.a}}$ is also not sufficient for determining whether a T(SC) estimate is actually quantitatively reliable. This issue is fully addressed later, in the example case study (Section 6).

Furthermore, note that all calculated values presented in this section are dependent on the set of values used for the SC test parameters (here from Table 4) and other arbitrary constants ($s_{\mathrm{w.f.min}}$, $s_{\mathrm{w.a.min}}$). Accordingly, in a practical context, *potential* estimable ranges for T^* should be computed independently for each test of the analyzed SC dataset, since both the test parameters and the available drawdown vary from one test to another.

4. Sensitivity analysis of the two T(SC) estimation methods

4.1 Implementation

A further step towards a better understanding of both inverse solutions —i.e. the T(SC) estimation methods— is achieved through a sensitivity analysis. This aims to study how T(SC) estimates are impacted by forced variations of one of the input parameters of the inverse solution, notably in order to identify the most important parameters which control the estimation.

Whichever one of the two methods is used, the T(SC) inverse solution has the following four input parameters: specific capacity ($Q/s_{\mathrm{w.f}}$), test duration (t_{f}), well radius (r_{w}), and local aquifer storativity (S). Since the ultimate purpose of the inverse solution is to estimate a priori unknown actual transmissivities (T^*), this study is done for the following two arbitrarily set values of this variable: T^* = 1×10^{-4} m^2/s, and T^* = 1×10^{-7} m^2/s, representing respectively "high" and "low" transmissivity scenarios. Reference t_{f}^*, r_{w}^*, and S^* (i.e. value of each parameter when it is not altered) are set to the same typical values as in the previous section (i.e. from Table 4). Differently, reference $Q/{s_{\mathrm{w.f}}}^*$ is evaluated using some arbitrary Q^* as the numerator, and its consequent final

drawdown prediction $s_{\mathrm{w.f}}{}^{*} = s_{\mathrm{w.f}}(T^{*}, Q^{*}, \ldots)_{\mathrm{PCb}}$ as the denominator. The latter is calculated using the PC-based forward solution, since a plausible drawdown respecting the $s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.max}}$ constraint is desired.

A series of parameter variation coefficients (symbolized as *c*) is then prepared. A wide range of variation, going from 1/20 to 20/1, is considered in order to fully explore the potential nonlinearities away from the reference case. Then, for each of the four input parameters, a series of transmissivity estimates (expressed simply as T thereafter) are computed using the inverse solution with altered values for the current i^{th} input parameter ($x_i = x_i{}^{*} \cdot c_i$), and intact values for the other three ($x_{\neq i} = x_{\neq i}{}^{*} \cdot 1.0$). Finally, the output results are expressed as "change ratios" $\stackrel{\mathrm{def}}{=} T/T^{*} \in]0, \infty[$, or as "deviation ratios" $\stackrel{\mathrm{def}}{=} \max(T/T^{*}, T^{*}/T) \in [1, \infty[$, and analyzed.

4.2 Results

Table 6 below summarizes and defines the parameters used for the sensitivity analysis. But before interpreting the data presented in Table 6, some explanations are necessary. Specific capacity ($Q/s_{\mathrm{w.f}}{}^{*}$) is calculated using the theoretical prediction for the "true" final drawdown ($s^{*}_{\mathrm{w.f}}$) based on the PC-based forward solution with unaltered SC test parameters (indicated through "$c = 1$"): hence $s^{*}_{\mathrm{w.f}} \equiv s_{\mathrm{PCb}}(c = 1)$ in Table 6. The threshold c values for the three main input parameters of the PC-based inverse solution are calculated using the three formulas of Equation 19. Moreover, $s_{\mathrm{Tb}}(c = 1)$ and $s_{\mathrm{PCb}}(c = 1)$ are the theoretical predictions for $s_{\mathrm{w.f}}$ obtained using respectively the Theis-based (Equation 12) and the PC-based (Equation 8) forward solutions with unaltered SC test parameters.

Table 6: Calculated dimensionless ratios, parameter thresholds, and theoretical drawdowns related to the two transmissivity scenarios considered in the sensitivity analysis.

		Transmissivity scenarios	
		"high T^* scenario"	**"low T^* scenario"**
Actual transmissivity	T^*	1.00×10^{-4} m²/s	1.00×10^{-7} m²/s
Wellbore storage contribution ratio	ws^*_{cr}	4.09 %	95.1 %
Actual specific capacity	$Q/s_{\mathrm{w.f}}{}^*$	1.24×10^{-4} m²/s	5.33×10^{-6} m²/s
Actual specific capacity / actual T^*	$Q/s_{\mathrm{w.f}}{}^* \div T^*$	1.24	53.3
Theis-based T estimate / actual T^*	$T_{\mathrm{Tb}}(c=1) \div T^*$	1.01	28.3
Threshold variation coefficients (c): · Minimum c for specific capacity · Minimum c for test duration · Maximum c for well radius	$c_{\min}$ or $c_{\max}$ · $(Q/s_{\mathrm{w.f}})_{\min}$ · $(t_{\mathrm{f}})_{\min}$ · $(r_{\mathrm{w}})_{\max}$	 0.0409 0.0409 4.94	 0.951 0.951 1.03
Drawdown with Theis-based solution	$s_{\mathrm{Tb}}(c=1)$	3.08 m	1002 m
Drawdown with PC-based solution	$s_{\mathrm{PCb}}(c=1)$	3.06 m	71.0 m
Theoretical maximum possible drawdown in the pumped well	$s_{\mathrm{w.max}}$	74.7 m	74.7 m

First, the computed ws^*_{cr} values confirm that the T^* values chosen for the high- and low-transmissivity scenarios indeed correspond to distinct conditions where wellbore storage is respectively unimportant and very important. Note that the calculated $s_{\mathrm{w.max}}$ = 74.7 m for both scenarios. Also, different $Q/s_{\mathrm{w.f}}{}^*$ values are obtained depending on the T^* scenario. For the high T^* scenario, $Q/s_{\mathrm{w.f}}{}^*$ is about 25 % higher than T^*, whereas for the low T^* scenario, $Q/s_{\mathrm{w.f}}{}^*$ is about 53 times the T^*. Accordingly, $T_{\mathrm{Tb}}(c=1)/T^*$ ratios recall the strong overestimation bias of the Theis-based inverse solution when T^* is low (as previously shown in Figure 17). Indeed, for the low T^* scenario, the T_{Tb} value obtained from inversion of unaltered input parameters is 28.3 times the T^* value. The reason for this systematic bias is that the Theis-based inverse solution expects a much larger drawdown in the well (and thus a much smaller specific capacity) when T^* is low, as it does not consider wellbore storage. For instance, if using the same Q as in Table 4, the final drawdown predicted by the Theis-based forward solution for the low T^* scenario is 1002 m: a clearly unrealistic prediction of 13.4 times the $s_{\mathrm{w.max}}$. Conversely, in the high T^* scenario, both the forward and the inverse Theis-based solutions appear unbiased: i.e. $s_{\mathrm{Tb}} \approx s_{\mathrm{PCb}}$, and $T_{\mathrm{Tb}} \approx T^*$. Furthermore, Table 6 discloses that the threshold (minimum or maximum) variation-coefficient (c) values for the three main input parameters of the PC-based inverse solution also

can be calculated directly from ws^*_{cr}. Indeed, it emerges that $c_{\min} = ws^*_{\mathrm{cr}}$ for both specific capacity ($Q/s_{\mathrm{w.f}}$) and test duration (t_{f}), whereas $c_{\max} = (ws^*_{\mathrm{cr}})^{-1/2}$ for well radius (r_{w}); an interesting finding revealing another use for the wellbore storage ratio.

The main results of the sensitivity analysis are presented graphically in Figure 19.

Figure 19 first shows that T varies almost linearly with $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ in the high T^* scenario, whichever estimation method is used, as confirmed by the close match between the "$Q/s_{\mathrm{w.f}}$" curve and the "linear response" curve (Figure 19.a1,b1). In the low T^* scenario, however, the variation with $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ is roughly linear only for the Theis-based inverse solution, but then estimates are affected by a large and systematic overestimation bias ($T \sim 28 \times T^*$) even at $c = 1$, which explains why the "$Q/s_{\mathrm{w.f}}$" curve does not match the "linear response" curve at all (Figure 19.a2). T tends to vary linearly with the logarithm of c, for t_{f}, r_{w}, and S (with simple positive, double negative, and simple negative slopes, respectively). The log-linear relationships, however, appear systematic only for Theis-based results (Figure 19.a1, and also Figure 19.a2 but to a lesser extent). The only parameter for which the log-linear relationship remains strong in all four graphs (and thus, for the two estimation methods) is S. In practical terms, still according to the overall slopes of the T/T^* vs. $\log c$ curves for each input parameter, these results thus indicate that a positive error in the input $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ or in the input t_{f} will induce overestimation of T^*, whereas a positive error in the input r_{w} or in the input S will lead to underestimation of T^*.

Moreover, Figure 19 reveals that T varies in a complex, highly non-linear fashion with r_{w} or t_{f} when the PC-based inverse solution is used. Indeed, there are thresholds beyond which the modified input parameters simply cannot be inverted while respecting the $s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.max}}$ constraint inherent to the PC solution, resulting in "impossible" estimates (marked as 'N/A', in the graphs). These threshold coefficients (relevant only for the PC-based inverse solution) can be easily calculated using the three formulas of Equation 19 (in Section 3.7). For this particular analysis, we thus obtain the maximum or minimum threshold c values reported in Table 6, and indicated in Figure 19.b1,b2 by dotted colored vertical lines. Portions of the curves far beneath the thresholds are similar for both inverse solutions, which is simply explained by the fact that $ws_{\mathrm{cr}} \ll 100$ % in such conditions. This again confirms that the Theis-based inverse solution can perform practically as well as PC-based inverse solution, as long as ws_{cr} is below some other (more tolerant) threshold value yet to be determined.

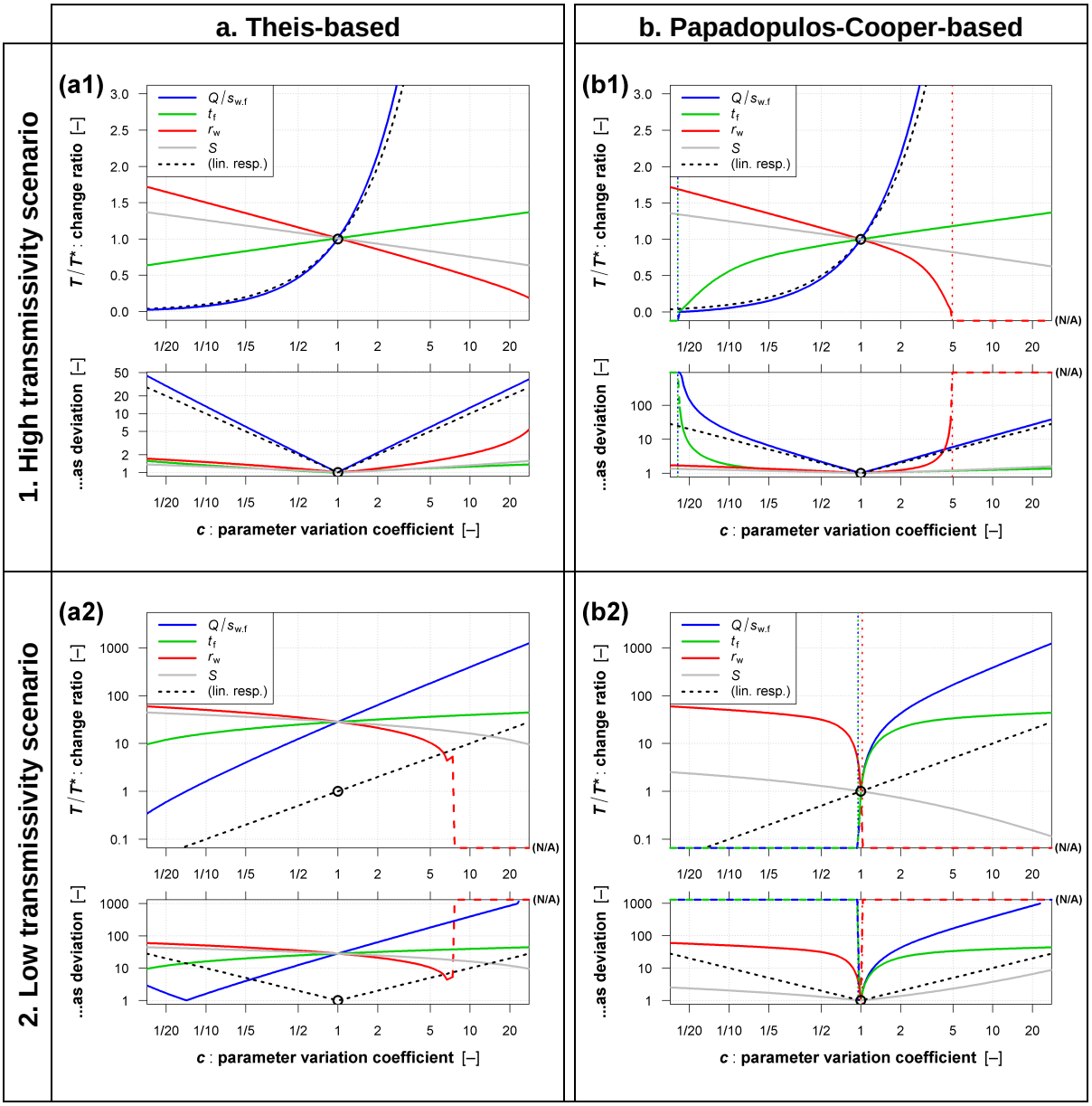


Figure 19: Results of the sensitivity analysis of T(SC) to independent variations of each of the input parameters, presented as change ratios (and derived deviation ratios) as a function of the applied parameter variation coefficients (c), for (1: upper row) a high transmissivity scenario where T^* = 1×10^{-4} m^2/s, and (2: lower row) a low transmissivity scenario where T^* = 1×10^{-7} m^2/s; using either (a) the Theis-based inverse solution or (b) the Papadopulos-Cooper-based inverse solution. Colored curves represent the main results. The dotted black curve (or line) represents the theoretical case of purely linear response to applied parameter variation, i.e. $T/T^* = c$; this visual indication is included because the use of log axes makes it difficult to detect linearity directly and solely from a parameter's curve. Ranges of "impossible" estimates are drawn as thick dashed curve segments following the plot outline, and marked as 'N/A', in the graphs. Threshold values for c beyond which estimates become "impossible" are indicated by thin dotted straight vertical lines drawn with the color of the varied parameter. The typical SC test parameters from Table 4 are used to define the reference case (c = 1).

Taken together, these thresholds underscore that not all combinations of input parameters are actually possible (i.e. complying with the $s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.max}}$ constraint inherent to the PC solution), and that the PC-based estimation method becomes increasingly sensitive to variations in any of the three input parameters $Q/s_{\mathrm{w.f}}$, t_{f}, and r_{w}, as actual T^* decreases and ws_{cr} approaches 100 %. This is best illustrated by the low T^* scenario (Figure 19.b2), in which even moderate input parameter variations: $r_{\mathrm{w}} * 1/2$, or $t_{\mathrm{f}} * 2$, or $Q/s_{\mathrm{w.f}} * 2$, result in T/T^* ratios up to ~50/1. In comparison, the same variations result in T/T^* ratios up to ~2.2/1 only, in the high T^* scenario (Figure 19.b1).

In short, the PC-based inverse solution again appears to offer the best overall performance for T(SC) estimation, since it is able to infer the actual transmissivity with little bias even when the wellbore storage effect is very important (e.g. when T^* is very low), as long as the input SC test parameters are very close to the parameters actually used to carry out the SC test —or in here for calculating the theoretical final drawdown using the PC-based forward solution.

Yet this sensitivity analysis still has limited practical significance, since it does not assess the impacts of having errors affecting all SC data measurements simultaneously, which is in fact unavoidable in practice. Accordingly, further analyses must now be performed, with the aim of obtaining more realistic, practical findings.

5. Uncertainty analysis of the two T(SC) estimation methods

The sensitivity analysis (Section 4) provided, for the two T(SC) estimation methods, insight into the impact of the alteration of one of the input parameters on the output estimated T. It notably showed that T is very sensitive to all input parameters but S, starting with $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ (i.e. specific capacity itself). However, that analysis presented two major limitations precluding its transfer to practice: i) the range of tested alterations was theoretical and not scaled to actually expected uncertainties for each of the parameters, and ii) simultaneous alteration of all parameters was not addressed at all. Yet it is well known that real pumping test data, and especially that from routine SC tests carried out by well drillers, are unavoidably affected by measurement and reporting errors of various types, causes, and magnitudes (Cooley & Naff, 1990).

Table 7 below presents the common sources of errors in SC data. Magnitude is an important characteristic of actual errors that is specially considered in the following uncertainty analysis, because some parameters are easier to accurately measure than others, in practice, implying that the assumption of a uniform relative error (in %) for all parameters would be inappropriate. Moreover, although the way field operations are truly undertaken might in fact lead to occasional yet unintended systematic bias in the measurement of some of the SC test data, it is also considered, for the purpose of the following analysis, that actual uncertainties in the reported test data are overall unbiased and can therefore be viewed (and reproduced) as random errors following Gaussian normal distributions with zero mean and finite variance.

Table 7: Common sources of errors in specific-capacity test (SC) data (Part 1 of 2)

Parameter(s)	Common sources of errors pertaining to the reported values…	Level of reliability	Impacted variables
Q: Pumping or discharge rate	● Variations (instabilities) in the actual pumping rate conflicting with the assumption of constant discharge rate; ● Rough to crude methods for assessing the discharge rate; ● Common decrease of $Q(t)$ as dynamic water level drops down in the pumped well.	Low reliability for typical regional datasets (i.e. data routinely reported from well drillers)	● Specific capacity ● Predicted drawdown ● Estimated T(SC)
z_{stat}: Static water level in the pumped well right before the start of the SC test	● Water level often measured too long before the start of the test, or even at some completely unrelated point in time (e.g. other season), or sometimes too soon after recent drilling of the well; ● Incomplete/unknown/erroneous reported dates for the z_{stat} data; ● Inconsistencies between z_{stat} and z_{dyn} data, for instance when the data table with the z_{stat} data is prepared independently of the data table containing the well testing data, firstly for generating a potentiometric surface map of the study area rather than for T(SC) estimation (→ incompatibility in the expected use of the z_{stat} data)	Low to high reliability, depending on the precision of the measurement and its consistency with the other SC test data	● Specific capacity ● Reported drawdown ● Estimated T(SC)
z_{dyn}, and t_{f}: Dynamic water level in the pumped well, and pumping duration	● Asynchronous measurement of these two parameters; ● Lost precision due to rounding of the test duration value (e.g. 57 min → 1 h; 34 min → 0.5 h or even 1 h); ● Absence of information regarding the stability of the dynamic water level when the measurement was taken (at t_{f}); ● Tendency of the well drillers to use high pumping rates which often result in the complete dewatering of the well (above the pump); ● Frequent cases of z_{dyn} values approaching the limit value imposed by the limited available drawdown constraint ($z_{\mathrm{dyn}} \rightarrow z_{\mathrm{stat}} - s_{\mathrm{w.a}}$) so that measured z_{dyn} at test end is not deep enough to represent the theoretically expected water level at t_{f} if there had not been such constraint (see Section 3.8 for more details).	z_{dyn}: Same as for z_{stat} t_{f}: High reliability if values are not roughly rounded, low reliability otherwise	● Specific capacity ● Reported drawdown ● Predicted drawdown ● Estimated T(SC)

Table 7 …Continued… (Part 2 of 2)

Parameter(s)	Common sources of errors pertaining to the reported values…	Level of reliability	Impacted variables
r_w (and r_c): Radius of the open hole of the pumped well (and that of the well casing, if different)	● Frequent lack of information about the actual part of the well from which diameter was measured (of well casing above the ground? of well screen? of drill hole? of open hole in a rock aquifer?); ● Often necessary assumption that $r_c \approx r_w$ since the two data are rarely both available; ● Effective diameter in fact often variable along the well in the interval over which the water level declines during the pumping (especially frequent in open hole sections of wells drilled in soft/brittle rock → rough/uneven wall → irregular diameter) (as highlighted by Risser, 2010).	High reliability in general, but lower in studies focusing on open boreholes in rock	● Predicted drawdown ● Estimated T(SC)
S: Aquifer storativity around the pumped well	This parameter is roughly approximated from auxiliary data (often from a regional map describing the hydrogeological settings, translated into S values by using typical values from the literature), since S cannot be estimated from a SC test (as the required full time-drawdown data record is unavailable). Thus, most of the error is inherited from the uncertainties pertaining to the auxiliary data used, notably related to: ● wrong hydrogeological setting inferred for some locations; ● partial incompatibility between the regional scale of the map and the very local scale of the SC test scale; ● extraction of improper aux. data when reported well location is imprecise; ● often poor knowledge of the aquifer local saturated thickness (b) and specific storage (S_s), preventing efficient estimation of S from the conventional formula $S \sim b \cdot S_s$, and thus explaining why uniform values of S are assigned to each different hydrogeological setting of the utilized map.	Low reliability (but with relatively minor impact on drawdown prediction, T estimation, as well as T* (i.e. actual transmissivity) inference, since all three are little sensitive to S) (e.g., see Annexe A6.3)	● Predicted drawdown ● Estimated T(SC)
All	● Occasional mistakes in the reported measurement units, made mostly during processing and management of regional databases: some are easy to detect (values appear as outliers), but some others are virtually undetectable (values seem plausible with their current unit); ● Possibly biased estimation of some of the parameters by the well drillers (e.g. a systematic tendency to overestimate the pumping rate Q or t_f by rounding up to next integer in usual units, US gallons per minute and hours respectively).	Reliability of the reported measurement units is deemed high, once the database has been validated	● All variables…

5.1 Implementation

The following Monte Carlo approach was developed to better quantify the uncertainty in the T estimates stemming from the application of scaled random perturbations (~ noise imitating actual errors) to a synthetic input SC dataset. Transmissivity is expressed as $\log T$ or $\log T^*$ throughout the process, chiefly for convenience, but also because this property actually tends to be log-normally distributed in general (Wong *et al.*, 1984; Rehfeldt *et al.*, 1992; Bear & Cheng, 2010). The basic idea behind the approach is to compare the $\log T$ estimates obtained from inversion of "noisy" synthetic SC data with added random errors, against the original $\log T^*$ values they are tied to.

The stochastic modeling approach consists of the following main steps:

1. First, a wide range of "original" (i.e. exact) $\log T^*$ values to explore (and try to estimate) is defined: $\log T^* \in$ [-10.1, -1.9], and filled with a large number (N = 246,000) of uniformly distributed $\log T^*$ values.
2. In parallel, an "original" (i.e. exact, error-free) synthetic SC dataset, of N rows too, is prepared. The typical values presented in Table 4 are used as the constant SC test parameters for calculating the "exact" theoretical prediction for the final drawdown for each of the N virtual tests, using the Papadopulos-Cooper-based forward solution: $s_{\mathrm{w.f}}^* = s_{\mathrm{w.f}}(T^*, Q^*, t_{\mathrm{f}}^*, r_{\mathrm{w}}^*, S^*)_{\mathrm{PCb}}$. These five data columns: Q^*, t_{f}^*, r_{w}^*, S^*, and $s_{\mathrm{w,f}}^*$, thus constitute the full "original" SC dataset, which remains inherently tied to the $\log T^*$ data (through $s_{\mathrm{w.f}}^*$).
3. Then, a "noisy" synthetic SC dataset is prepared by adding unbiased random noise (simulating deviations deemed typical of actual errors) to a copy of the original (error-free) synthetic SC dataset. In order to scale the simulated synthetic noise, the random error generator is configured specifically for each of the five data columns using the plausible "deltas" defined in Table 8, so that the 95$^{\mathrm{th}}$ percentile of the Gaussian noise distribution for that parameter equals the prescribed delta.
4. The chosen T(SC) estimation method (i.e. inverse solution) is then applied to this noisy synthetic SC dataset, row by row, in order to obtain a new data series of N "estimated" (inexact, error-affected, and thus uncertain) $\log T$ values.

5. The estimated transmissivities ($\log T$: *without asterisk*) are finally compared with the original transmissivities ($\log T^*$: *with an asterisk*) they are tied to, notably through analysis of the calculated T/T^* ratios. For this specific purpose, these three main variables ($\log T^*$, $\log T$, and T/T^*) are concurrently transformed into categorical variables to produce relative frequency computations. Categorization of $\log T^*$ and $\log T$ is achieved using a common regular-interval discretization scheme, while T/T^* is categorized into "estimation accuracy levels" using either of the classification schemes in Tables 9 and 10. The obtained relative frequency tables are especially informative when plotted and thus greatly facilitate the interpretation of the results.

Note that the program code developed in the R language (R Core Team, 2017) for implementing this Monte-Carlo based uncertainty analysis are provided in Annexe A6.4, allowing the reproducibility of the results presented thereafter.

Table 8: Deviation deltas used in the random error generation process to fix the 95th percentile of the Gaussian noise distribution of each parameter, for preparing the "noisy" synthetic SC data

Parameter	Δ_{err} in usual units [a]	Δ_{err} in SI units [a]	Algorithm [b]
Q	δ_{err} = 10.0 % (relative) (Δ_{err} = 0.600 US gpm)	δ_{err} = 10.0 % (relative) (Δ_{err} = 3.78×10^{-4} m^3/s) [c]	NNA
$s_{\mathrm{w.f}}$	Δ_{err} = 1.00 ft	Δ_{err} = 0.305 m	NNA
t_{f}	Δ_{err} = 10.0 min	Δ_{err} = 600 s	NNA
r_{w}	Δ_{err} = 0.500 in	Δ_{err} = 0.0127 m	NNA
$\log S$	Δ_{Lerr} = log 10.0 = 1.00	Δ_{Lerr} = log (1+9.00*1) [d]	LNNA

[a] The deviation deltas were defined based on practical documentation wherever possible (for Q: Osborne (1993), Risser (2010); for $s_{\mathrm{w.f}}$: Sweet *et al.* (1990), Post & von Asmuth (2013)), or else set to arbitrary values deemed representative of actual error magnitudes (for t_{f}, r_{w}, and $\log S$).

[b] Two algorithms are proposed for error generation: normal noise addition ('NNA') works for all parameters but S, for which lognormal noise addition ('LNNA') is to be preferred owing to the well-known lognormal nature of S. Please refer to the R program codes for more details on their implementation (Annexe A6.4).

[c] Calculated Δ_{err} effectively used for noisy Q data generation, based on the reference Q^* value.

[d] This log-scale delta (Δ_{Lerr}) results in lognormal errors ranging mostly between 1/10 and 10/1.

Table 9: Classification scheme used for the transformation of the T/T^* ratios numerical variable into a categorical variable of "signed estimation accuracy" levels prior to cross-tabulation computations. This scheme is used in bar graphs of Figures 20 and 21.

Class definition: T/T^* interval	Class label in graphs	Meaning of the class label: "The classified T estimate is…"
$\{0\}$ (i.e. -IND)	-IND	…indeterminate (→ low T^*).
]1/∞ , 1/10]	-vpoor	…very poor, underestimating T^*.
]1/10, 1/5]	-poor	…poor, underestimating T^*.
]1/5 , 1/2]	-good	…good, slightly underestimating T^*.
]1/2 , 2/1]	±vgood	…very good, close to the original T^*.
]2/1 , 5/1]	+good	…good, slightly overestimating T^*.
]5/1 , 10/1]	+poor	…poor, overestimating T^*.
]10/1 , ∞/1[	+vpoor	…very poor, overestimating T^*.
$\{\infty\}$ (i.e. +IND)	+IND	…indeterminate (→ high T^*).

Table 10: Classification scheme used for the transformation of the T/T^* ratios numerical variable into a categorical variable of "unsigned estimation accuracy" levels prior to cross-tabulation computations. This scheme is used in area graphs of Figures 20 and 21.

Class definition: T/T^* domain	Class label in graphs	Meaning of the class label: "The classified T estimate is…"
[1/2, 2/1]	vgood	…very good, close to the original T^*.
[1/5, 1/2[∪]2/1, 5/1]	good	…good, slightly under/overestimating T^*.
[1/10, 1/5[∪]5/1, 10/1]	poor	…poor, under/overestimating T^*.
[1/∞, 1/10[∪]10/1, ∞/1]	vpoor	…very poor, under/overestimating T^*.
$\{0, \infty\}$ (i.e. ±IND)	IND	…indeterminate (→ low/high T^*).

5.2 Results

5.2.1 Interpretation of the main graphical results

Figure 20 plots the results of the uncertainty analysis for each of the two T(SC) estimation methods (i.e. inverse solutions) as a function of the *original* $\log T^*$ mid-interval values (in the X axes).

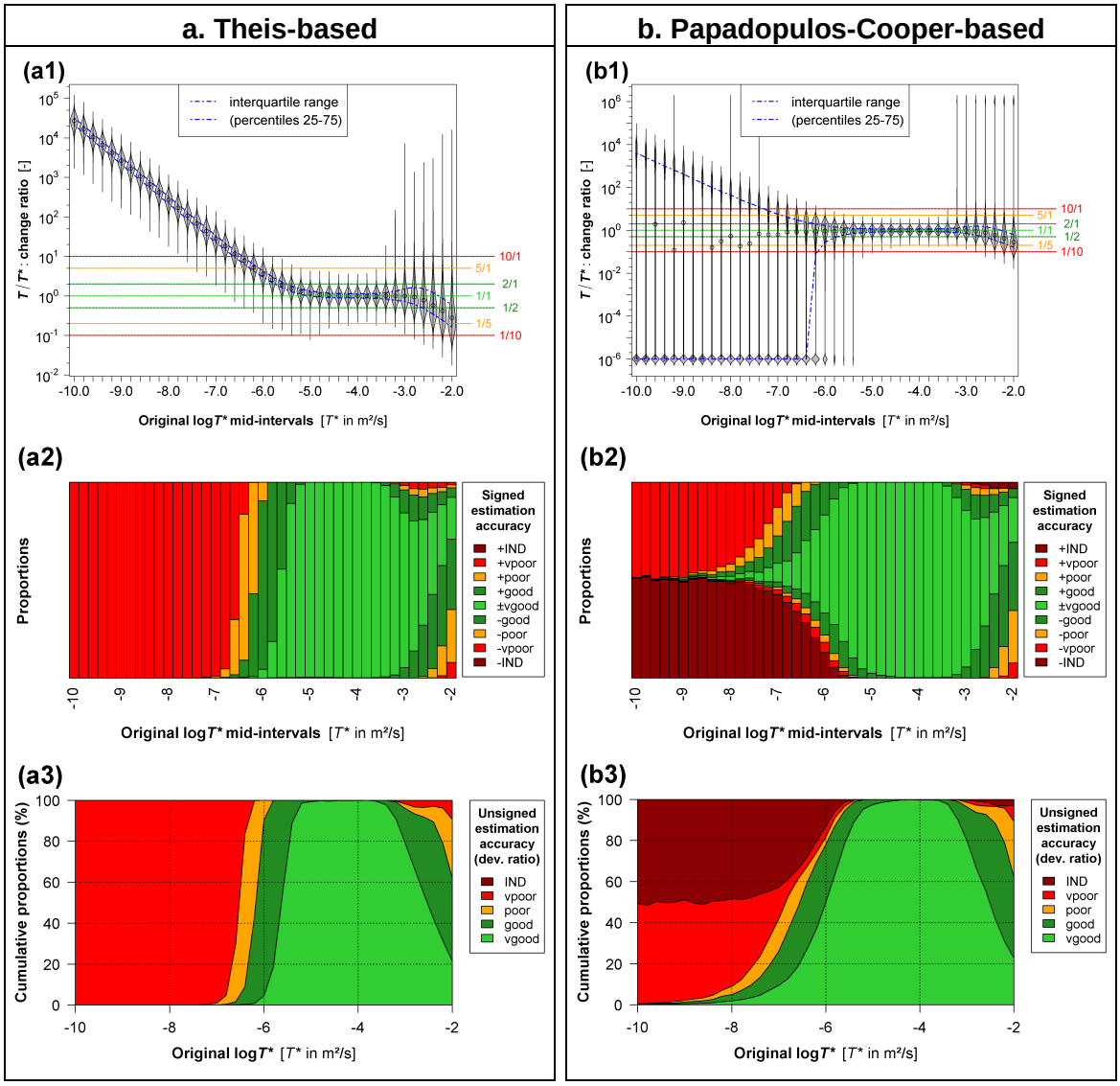


Figure 20: First series of graphical results of the uncertainty analysis of the two T(SC) estimation methods, based on the set of typical SC test parameters from Table 4 and on synthetic errors of typical magnitudes from Table 8. The results are expressed as a function of the "original" $\log T^*$ values (in the X axis). (a) Left column presents the results obtained using the Theis-based inverse solution, whereas (b) right column presents the results obtained using Papadopulos-Cooper-based inverse solution. (1) Graphs of the first row are violin plots of $\log(T/T^*)$, which give the most direct picture of the T/T^* data falling inside each interval of $\log T^*$. Median T/T^* within each interval is drawn as a small black circle marker. Thick black vertical lines indicate interquartile (25–75 %) ranges, the lateral variation of which is further exposed by the two dash-dot blue curves joining all 25th, then all 75th percentiles. The limit values (from first column of Table 9) used for translating T/T^* into categorical data are drawn as dotted colored straight lines, including a green line for the theoretical position of the ideal estimate $T/T^* = 10^0 = 1/1$. (2) Bar graphs of the second row show the proportions of estimates of each signed estimation accuracy level, within each interval of $\log T^*$. The bars are stacked base to top, from "-IND" to "+IND" categories, thereby filling in all $\log T^*$ intervals up to 100 %. (3) Area graphs of the third row depict the proportions of estimates of each unsigned estimation accuracy level, within each interval of $\log T^*$. The areas are stacked base to top, from highest to lowest accuracy levels, and followed by an "IND" category for the ±IND estimates.

This first series of graphical results shows that the Theis-based estimation method suffers from an important overestimation bias for the lower T^* values, as was suggested by the preceding explanatory example (Section 3.6). It is best visible in the left violin plot (Figure 20.a1), where medians deviate drastically from the T/T^* = 10^0 = 1/1 ratio line for $\log T^*$ < -6.5 or so. The strongly biased nature of the Theis-based method can also be denoted from Figure 20.a2: still for $\log T^*$ < -6.5, estimates are systematically classified as "+vpoor", meaning that $T > 10\,T^*$. Conversely, the PC-based estimation method apparently succeeds in keeping the median T/T^* around the 1/1 ratio line without any apparent bias (Figure 20.b1), although median positions are clearly very sensitive to noise (error) patterns in the inverted synthetic SC data —despite the fact that these results were generated using an artificially large number of synthetic tests. The seemingly unbiased nature of the PC-based method can also be noticed from Figure 20.b2, in which the "±vgood" bars (corresponding to 1/2 < T/T^* < 2/1) remain well centered at about half the height of the plot, as they are surrounded by like proportions of overestimates and underestimates. Moreover, regardless of the estimation method, deviations appear practically negligible (T/T^* ~ 1/1) for a similar range of $\log T^*$ values roughly between -5 and -3.5 (best seen in Figure 20.a3,b3).

Even though these results are basically interesting, they have almost no practical applicability, since the independent variable in the graphs of Figure 20, *original* $\log T^*$, is in fact the unknown quantity we want to infer. To circumvent this, similar graphs are prepared, but now with *estimated* $\log T$ as the independent variable (Figure 21). This way, it becomes possible to assess the expected uncertainty related to a given T(SC) estimate, which is indeed the readily obtainable quantity in practice. One noticeable difference in the data preparation for these graphs is the now variable number of data per $\log T$ interval, which can even result in empty intervals (indicating then that there are no estimates falling inside those intervals). That is why a "void" pseudo-category is expressly included in the legends of this second series of graphs (see Figure 21 below).

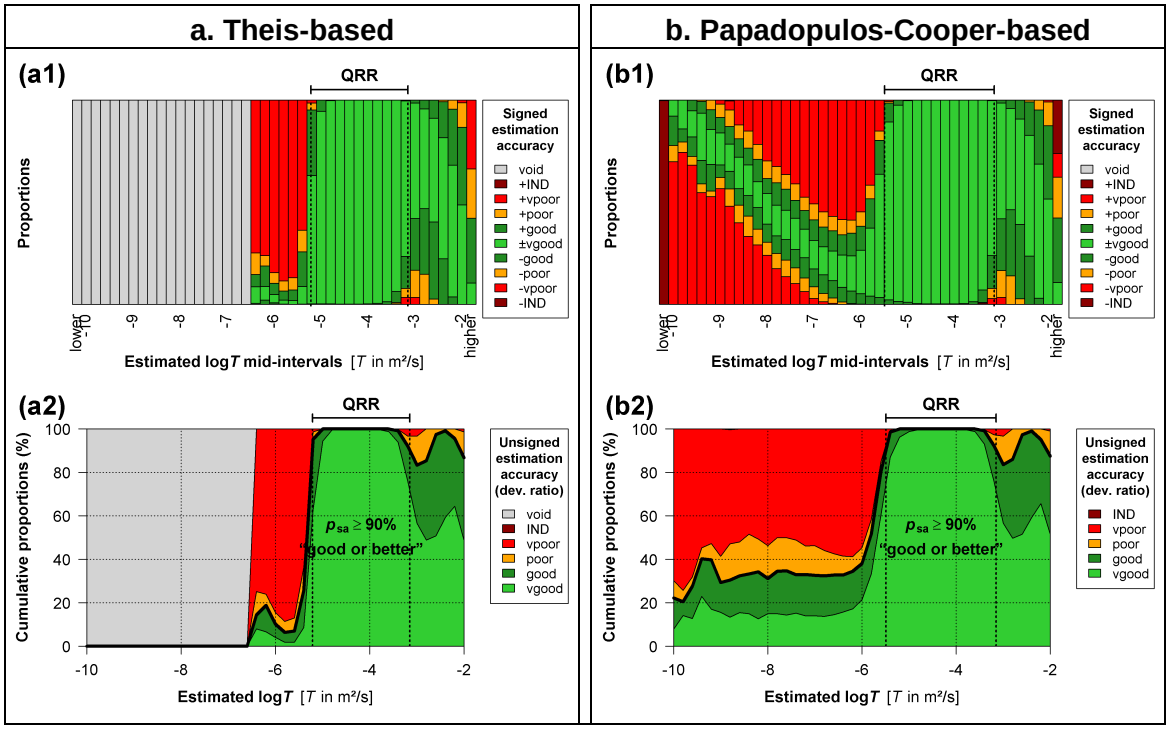


Figure 21: Second series of graphical results of the uncertainty analysis of the two T(SC) estimation methods, expressed as a function of the *estimated* $\log T$ values (as the X axis), and still based on the set of typical SC test parameters from Table 4 and on synthetic errors of typical magnitudes from Table 8. (a) Left column presents the results obtained using the Theis-based inverse solution, whereas (b) right column presents the results obtained using Papadopulos-Cooper-based inverse solution. (1) Bar graphs of the first row show the proportions of estimates of each signed estimation accuracy level, within each interval of *estimated* $\log T$. (2) Area graphs of the second row similarly pertain to the proportions of estimates of each unsigned estimation accuracy level, within each interval of *estimated* $\log T$. A whisker labeled 'QRR', with two black dotted vertical lines, indicates the $\log T$ range inside which estimates have ≥90 % probability of meeting the 'good' to 'very good' ("good or better") accuracy levels. This QRR is further detailed in Section 5.2.2. Most other details regarding the contents and graphical layout of the figure can be found in the legend of Figure 20.

These alternative graphs with estimated transmissivity ($\log T$) on the X axis indeed bring new information (Figure 21). Firstly, they confirm that the Theis-based estimation method is unlikely to produce any valid $\log T$ < -6.5 or so (Figure 21.a1,a2). Conversely, they show that the PC-based estimation method can produce $\log T$ values spanning over the entire exploration range of $\log T^*$ and even beyond: both the "lower" and "higher" categories, expressly added to the X axis, are indeed not empty (Figure 21.b1,b2). Secondly, the area graphs (Figure 21.a2,b2) can be interpreted in terms of the probability that an individual T estimate satisfies some estimation accuracy level. For instance, there are up to ~40 % of "good" to "very good" accuracy T estimates for $\log T$ < -6, according the PC-based results (Figure 21.b2). This suggests, in practical terms, that an estimated $\log T$ < -6 has only ~40 % chance of having a "good or better" accuracy level, a

probability which, although significant, is far from sufficient to guarantee that a given T estimate meets that accuracy level. As a contrasting example, Figure 21.b2 also suggests that $\log T$ estimates between -5 and -4 have ~100 % chance of meeting the "very good" accuracy level (i.e. 1/2 < T/T^* < 2/1).

In essence, Figure 21 thus demonstrates that estimates are in fact reliable only within a limited $\log T$ range, regardless of the estimation method, as a consequence of the noise added to the inverted input SC data. The lower and upper bounds of this range inside which T estimates may be considered quantitatively reliable (here indicated by a whisker labeled "QRR") were determined following the method described hereafter (Section 5.2.2). In addition, it is interesting to note that the presence of an upper bound amends the earlier interpretations in Section 3.6 which suggested that all estimates above some single threshold T value (e.g. around the proposed T_{c2}^* value) would be reliable. Furthermore, Figure 21.b1 now contradicts the conjecture of "the rather unbiased nature" of the PC-based estimation method that was proposed earlier (in the interpretation of Figure 20.b2). Indeed, the "very good" bars, here, are not surrounded by similar proportions of overestimates and underestimates for $\log T$ < -5.5 (i.e. below the lower bound of the QRR).

5.2.2 Definition of a quantitatively reliable range (QRR) for the T estimates

The uncertainty analysis thus provides much information on the reliability of T estimates obtained from inversion of realistic (noisy synthetic) SC data. In particular, it indicates the range within which the $\log T$ estimates are quantitatively reliable, i.e. accurate enough approximations of the original $\log T^*$ values. This range is designated under the acronym "QRR", which stands for "quantitatively reliable range". It is defined, in general, as the range of $\log T$ values within which the "proportion of sufficiently accurate estimates" (p_{sa}) remains close to 100 %, despite the random errors added to the input SC data and the limitations inherent to the estimation method used. In this specific implementation, T estimates are counted as "sufficiently accurate" only if they have a "good or better" ("good" to "very good") accuracy level (i.e. 1/5 < T/T^* < 5/1), and a given $\log T$ interval is defined as "quantitatively reliable" (QR) only if p_{sa} remains above a minimum probability threshold of $p_{\mathrm{samin}} \coloneqq 90$ % within.

Raw bounds for the QRR can hence be approximated directly from the bar graphs of Figure 21, simply by pinpointing the largest continuous sequence of QR small $\log T$ intervals, and then

extracting the $\log T$ values at both ends of that sequence. However, there is a better way to infer the bounds of the QRR with a resolution superior to the bar width (= 0.2), through the use of the $p_{\mathrm{sa}}(\log T)$ derived data describing the thick black curves delineating the "good or better" combined accuracy level in the area graphs (Figure 21.a2,b2). This improved method consists of finding the two precise $\log T$ values at which linearly interpolated p_{sa} is exactly equal to p_{samin}, near each of the two raw bounds. Note that in cases where p_{sa} would remain above p_{samin} up to one or even both ends of the X axis, the inferred QRR would be either half-bounded (e.g. [-6.00, +IND[) or unbounded (]-IND, +IND[). Thus, an indeterminate (±IND) computed bound for the QRR bound simply means that the actual bound is somewhere beyond the exploration range used in the uncertainty analysis. Moreover, in cases where p_{sa} would remain below p_{samin} all along the X axis, the inferred QRR would be an empty interval, noted as either 'null' or '∅'.

Through application of this procedure to the results of the uncertainty analysis, computed bounds of the QRR are thus [-5.21, -3.15] for the Theis-based estimation method, versus [-5.49, -3.15] for the PC-based estimation method. Thus, according to these specific results, only the lower bound of the QRR differs depending on the estimation method used, and the difference is quite small (~ -0.28 in log scale, i.e. a ~2 times smaller T value for the PC-based lower bound). Remember, though, that computed QRR's are tied to the SC test parameters and random-error generation settings that are considered in the uncertainty analysis process.

5.2.3 Qualitative similarity information for the T estimates outside of the QRR

The best way to visually summarize the full results of the uncertainty analysis, while further exploiting the QRR concept, is through a bivariate density plot of $\log T$ against $\log T^*$, as in Figure 22 below. Density plots are indeed far more efficient than scatter plots to visualize such large amounts of partially clustered point (X, Y) data. In Figure 22, the bounds of the QRR assessed earlier are used to divide the area of each plot into nine rectangular zones, of which only the main three zones along the diagonal are explicitly delineated here, thereby defining a classification scheme made of three zones (or classes) of "qualitative similarity". The central ('≈') zone represents the QRR itself, while the lower ('<') and upper ('>') zones represent the half-unbounded intervals respectively below and above the QRR. Further details about the graphical features of Figure 22 are provided in the figure legend.

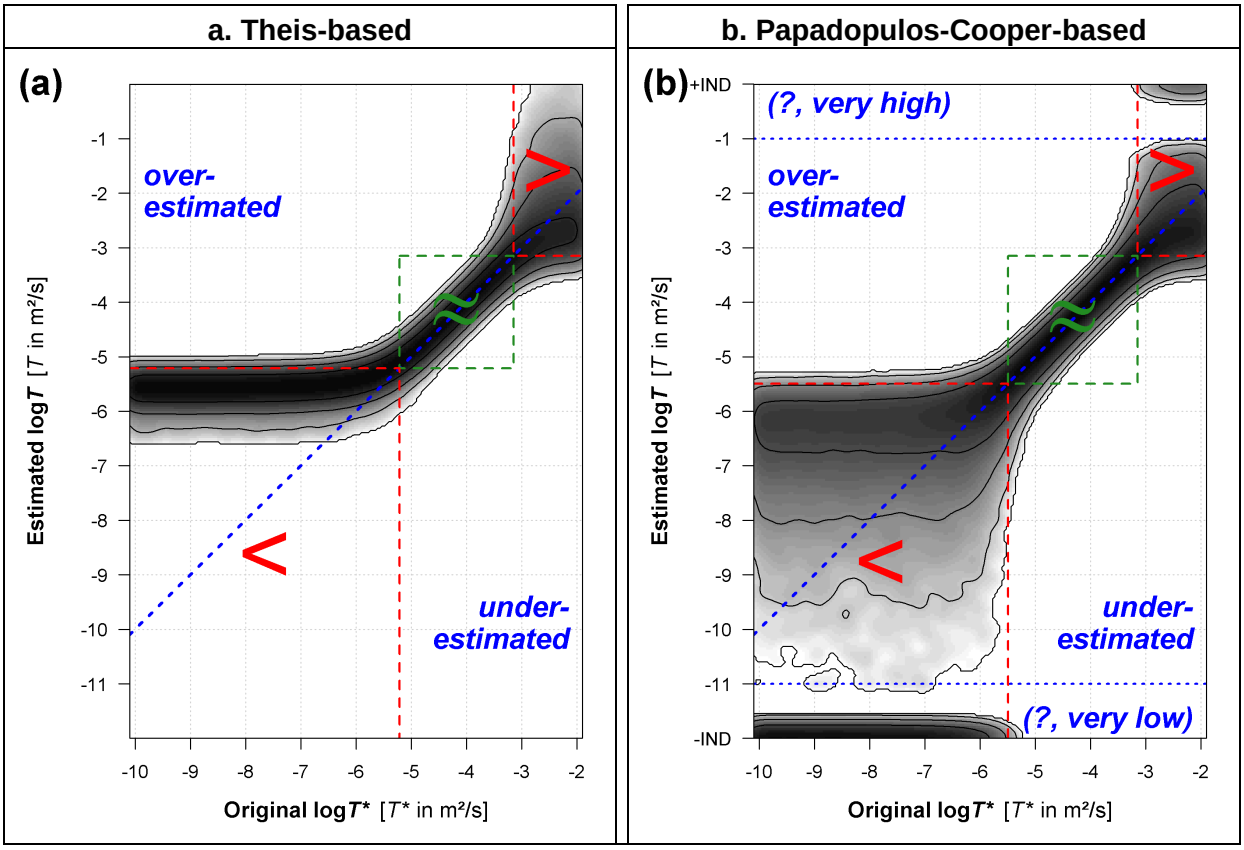


Figure 22: Bivariate kernel density estimate (2D KDE) plots summarizing the uncertainty analysis results with $\log T$ as the Y and $\log T^*$ as the X coordinate, for the two T(SC) estimation methods, based on the set of typical SC test parameters from Table 4 and on synthetic errors of typical magnitudes from Table 8. (a) Left column presents the results obtained using the Theis-based inverse solution, whereas (b) right column derives from the Papadopulos-Cooper-based inverse solution. Indeterminate (±IND) estimates are accounted for in the plots, through special overwriting of their Y coordinate (-IND → -12.0; +IND → -0.0). Computed density estimates are log-transformed and then illustrated following a gray scale spanning from very light gray (for lowest densities) to black (for highest densities), while practically negligible densities are blanked out. Contour lines of equal density (~probability) are drawn in black to make interpretation of the 2D KDE easier. The diagonal dashed blue line represents a theoretical perfect estimation accuracy ($\log T = \log T^* \Leftrightarrow T/T^* = 1$), and splits the plot area into an overestimation domain ($T > T^*$; above the line) and an underestimation domain ($T < T^*$; below the line). Computed bounds of the "quantitatively reliable range" (QRR) are used to separate the plot area into nine rectangular zones, of which only the main three zones of "qualitative similarity" are delineated here. The central ('≈') zone, drawn as a rectangle with a dashed green contour, thus outlines the QRR itself. The lower ('<') and upper ('>') zones, delimited by dashed red segments, represent the half-unbounded intervals respectively below and above the QRR.

Figure 22 confirms that, regardless of the estimation method used, $\log T$ values distribute very closely to their corresponding $\log T^*$ values only for an intersecting range matching the QRR (i.e. in the '≈' zone), as stated earlier. Below the lower bound of the QRR (i.e. in the '<' zone), $\log T$ values deviate in a very different manner depending on the estimation method used. Consistent

with earlier results, Figure 22a highlights that the Theis-based estimation method systematically overestimates low $\log T^*$ values. The left graph further reveals that the Theis-based $\log T$ values in the '<' zone concentrate about a single mode near -5.5. In contrast, the PC-based estimation method produces $\log T$ values dispersed both above and below the $\log T^*$ values, in the '<' zone, including a noteworthy proportion of -IND estimates already reaching >25 % around $\log T^*$ ≈ -6.5, and further increasing below (as was shown even more clearly in Figure 20.b3). In other words, the PC-based $\log T$ estimates tend to distribute between two modes (Figure 22b). The upper mode, of secondary importance, has a pattern similar to that for the Theis-based estimates, with peak densities occurring around a slightly lower value near -6.2. The lower mode, of primary importance, accounts for the many -IND estimates. In summary, a very similar ceiling effect is thus observed below the QRR, whatever the estimation method used, as further underscored by the general horizontal structure of the 2D density contours present in the '<' zone of both graphs (Figures 22a and 22b). This suggests that, as a consequence of the expected error components in the input SC data, a given $\log T$ value below the QRR has similar probability of corresponding to any $\log T^*$ value below the QRR (i.e. within the '<' zone).

In order to further exploit this last finding and thereby confirm the adequacy of the newly proposed classification scheme into three zones of "qualitative similarity" ('<', '≈', '>'), the point data ($\log T^*$, $\log T$) are now used to compute confusion matrices (Table 11).

Table 11: Confusion matrices computed for validating the plot-area division process underlying the classification of the $T - T^*$ difference data into zones of "qualitative similarity", for each of the two T(SC) estimation methods. (a) Left table presents the results obtained using the Theis-based inverse solution, whereas (b) right table presents the results obtained using Papadopulos-Cooper-based inverse solution. Each table is arrayed so that the cells directly coincide with the rectangular zones delineated in Figure 22: i.e. rows for estimated T zones, and columns for original T^* zones. Cell values of a given row report the relative frequency of estimates of this T zone falling in each T^* zone. The three green colored cells highlight the high probabilities associated with all coincident zones of qualitative similarity.

a. Theis-based			
	Proportion per T^* zone (%)		
T zone	'<'	'≈'	'>'
'>'	0.00	7.37	92.63
'≈'	6.03	90.18	3.79
'<'	99.31	0.69	0.00

b. Papadopulos-Cooper-based			
	Proportion per T^* zone (%)		
T zone	'<'	'≈'	'>'
'>'	0.00	7.29	92.71
'≈'	3.40	92.77	3.83
'<'	98.26	1.74	0.00

Table 11 above clearly validates the classification scheme. Indeed, coincident zones (green cells in the diagonal) all show very high probabilities above 90 %, a very acceptable match percentage. Consequently, this scheme may now be used to give qualitative relevance to estimates which fall outside the QRR ('≈') zone. Henceforth, a $\log T$ value falling inside the '<' zone will be interpreted as indicating that the unknown $\log T^*$ value is most likely "indefinitely lower than the lower bound of the QRR", whereas a $\log T$ value falling inside the '>' zone will be interpreted as indicating that $\log T^*$ is most likely "indefinitely higher than the upper bound of the QRR". This classification scheme is fully integrated into the workflow presented later in this paper (in the case study, Section 6.1.2).

In summary, two original and very useful concepts have emerged from this thorough interpretation of the uncertainty analysis results: the "quantitatively reliable range" (QRR), and the related three zones of "qualitative similarity". Together, these concepts allow a more robust exploitation of the T(SC) data in the end, as will be demonstrated in the application (Section 6).

Of course, the numerical results that have been presented herein (e.g. the computed QRR's) are tied to the settings used in this specific implementation (Section 5.1). Nonetheless, these specific output values are meaningful reproducible results, and should therefore be deemed appropriate, at least for any SC dataset effectively comparable to the synthetic one generated here, i.e. comprised of similar reported values for the SC test parameters.

However, since it is in fact highly unlikely that an actual SC dataset will consist in hundreds or thousands of tests conducted all with the exact same values for the SC test parameters, it is rather concluded that in practical applications, the QRR should be computed independently for each row of the analyzed SC dataset (i.e. each SC test), as was recommended earlier for the computation of the estimable ranges for T^* (in Section 3.8), and as instructed in the workflow that follows (in Section 6.1.2).

Furthermore, note that the QRR is little sensitive to the SC test parameter S (Annexe A6.3). This means, in practice, that a common QRR may be computed for several SC tests among which only the value of the S parameter varies, and provide a sufficiently accurate approximation for all of the individual QRR's that would have been obtained if the computation had been done independently for each SC test, as ideally recommended.

6. Application to the study area

This section aims to provide an example of how the exploitation of an actual SC dataset may be improved through the implementation of the concepts and tools presented in the previous sections of the paper, now in a practical context. The proposed new approach, fully described herein, is finally compared against the conventional approach, thereby further highlighting the benefits of using the former, while clearly disclosing the flaws of the latter.

6.1 Implementation

6.1.1 Study area

The study area (12,500 km^2) is located in eastern Canada, southern Quebec (Figure 23), with a total population of about 800,000 inhabitants, very unevenly distributed. Groundwater is the main source of drinking water for most of the municipalities with less than 5,000 inhabitants (Carrier *et al.*, 2013). There are more than 35,000 private water wells in the study area, about 90 % of which are open boreholes tapping the regional fractured-rock aquifer system. Two main geological provinces underlie the study area: the St. Lawrence Platform and the Appalachians (Thériault & Beauséjour, 2012). Main bedrock lithologies comprise shales, dolomites, limestones, and sandstones. The bedrock is significantly more fractured in the shallow subsurface (Ladevèze *et al.*, 2013). The surficial sediments overlying the bedrock are Late Quaternary in age and their depositional history is essentially related to the last glaciation-deglaciation events. The sediment cover is thickest in the northern part of the St. Lawrence Platform zone within the study area, to the north of the Monteregian Hills, where it is ~30 m thick on average and largely dominated by glaciomarine silts and clays, thus implying extensive mainly confined conditions in this zone. Elsewhere in the study area, the sediment cover is thinner (~0–10 m) and generally more permeable (less-compact tills, mainly), especially in the Appalachians, thus rather implying mostly semi-confined to unconfined conditions.

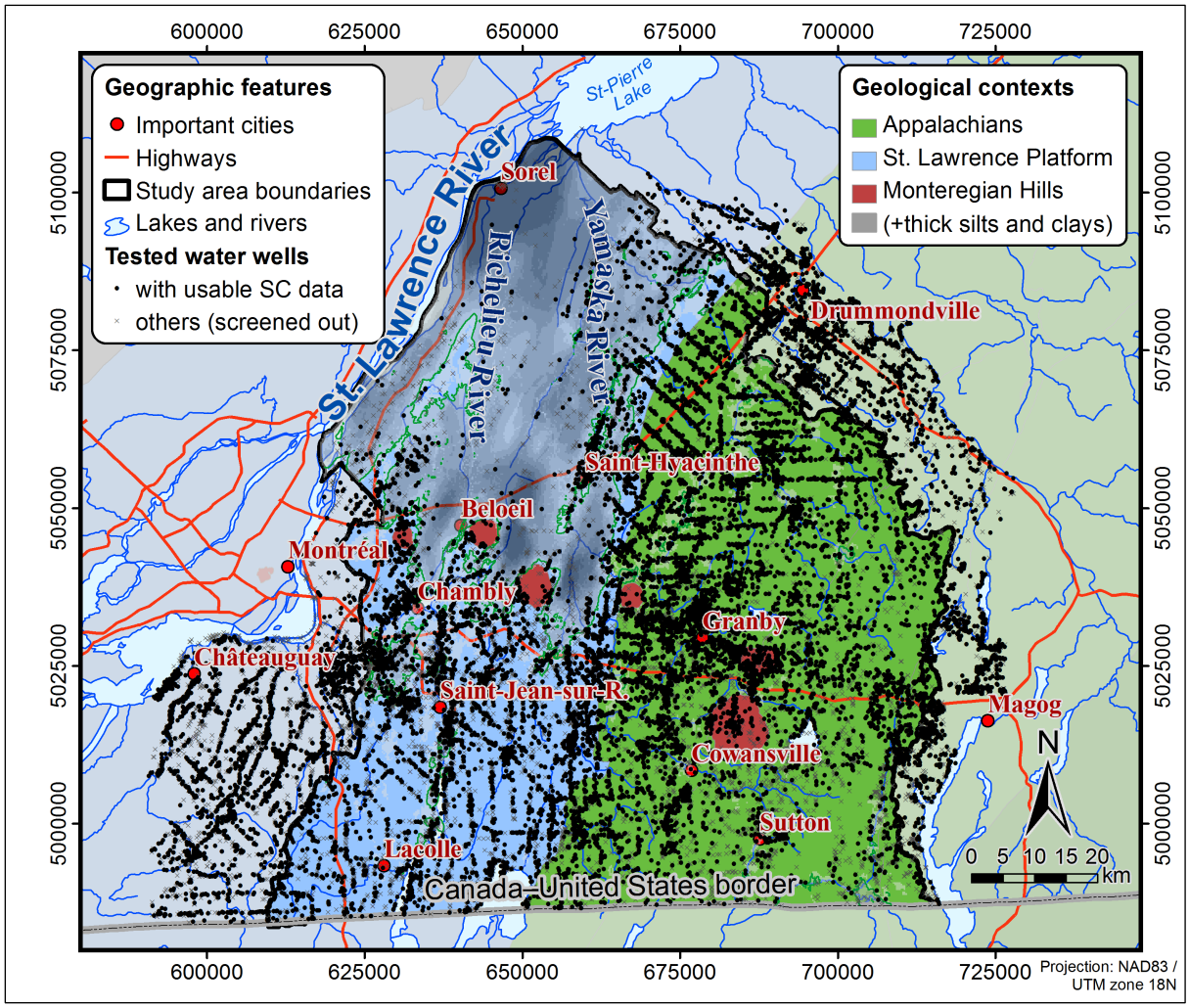


Figure 23: Overview of the study area.

A key asset of this study area is that abundant data are available from a recent regional hydrogeologic assessment project that was carried out between 2009 and 2013 (Carrier *et al.*, 2013), as part of Quebec government's systematic groundwater resources assessment program ("PACES") which involved Quebec universities in partnership with regional organizations (Ouellet *et al.*, 2011; Palmer *et al.*, 2011). These data notably include 18,313 usable SC test data (indicated as black dots in Figure 23) originally reported in a public water well database called in French the "Système d'information hydrogéologique", and managed by Quebec Ministry of the Environment since 1967 (Gouvernement du Québec, 2017).

6.1.2 Data processing workflow

Step 1: Initial preparation of the input SC dataset

Table 12 summarizes the source data used in this case study, including descriptive statistics as well as reliability issues (noticed during the preparation of the SC dataset) for each parameter.

Table 12: Summary of the prepared input SC data fields and of the source data fields imported from the regional database to prepare them for the purpose of the case study. A few descriptive statistics about these parameters, evaluated after data screening, are provided. The reliability issues listed here should be read together with the sources of errors in SC data listed in Table 7.

Parameter prepared	Source data fields from the regional database	5–95 % range (after data screening)	Modal value or interval (after screen.)	Reliability issues (non exhaustive)
Q	Reported as is	7.5×10^{-5} – 2.5×10^{-3} m³/s (4.5–150 L/min; 1.2–40 US gpm)	3.78×10^{-4} m³/s (22.7 L/min; 6.00 US gpm) (9.2 %)	Some outliers suggesting the wrong units were reported
$s_{\mathrm{w.f}}$	Calculated from static (z_{stat}) and dynamic (z_{dyn}) water level data: $s_{\mathrm{w.f}} = z_{\mathrm{dyn}} - z_{\mathrm{stat}}$	1.2–82 m (4.0–270 ft)	0–5 m interval (19 %)	Some incoherent values, especially vs. the calculated $s_{\mathrm{w.max}}$
t_{f}	Reported as is	0.5–8 h	1.0 h (63 %)	All plausible values, but might be rounded
r_{w}	Calculated from reported well casing diameter divided by 2	0.025–0.076 m (1–3 in)	0.0762 m (3 in) (86 %)	Radius of what part of the well: casing, open-hole section? is often not clearly reported
S	Inferred from categorical data on the local hydrogeological setting: confined ~ 5×10^{-5}, semi-confined ~ 5×10^{-3}, and unconfined ~ 0.01	Relative frequency table: - semi-confined (58 %) - unconfined (22 %) - confined (20 %)		Inferred values are typically rough estimates…
$s_{\mathrm{w.a}}$	Calculated from well bottom depth (z_{wbot}) and z_{stat} : $s_{\mathrm{w.a}} \approx z_{\mathrm{wbot}} - \Delta z_{\mathrm{pump}} - z_{\mathrm{stat}}$, assuming that the pump used during the test is ~1 m above the bottom of the well: Δz_{pump} ~ 1 m	9.0–89 m (30–290 ft)	15–20 m interval (12 %)	Actual information regarding the pump location within the well is rarely available, hence the constant Δz_{pump} assumption…
d_{w}	Calculated from local depth of top of bedrock (z_{toprock}) and well bottom depth (z_{wbot}) : $d_{\mathrm{w}} = z_{\mathrm{wbot}} - z_{\mathrm{toprock}}$	2.8–88 m (9.2–290 ft)	5–10 m interval (12 %)	Uncertainties in the z_{toprock} depth data Vagueness in the type of reference elevation used (Is it the ground, the top of casing, …?)

Note that although the statistics presented in Table 12 are of course tied to the SC dataset of the study area, the rest of the information in the table is rather general and should thus be readily usable in most regional studies where a regional SC dataset of similar structure is available.

Step 2: Data screening

Although some of the inconsistencies in the prepared SC dataset can be identified and rectified (e.g. extremely small or large Q values likely due to inconsistencies between the reported values and units for these data, rectified by deducing the correct unit), most of the unusable values (outliers) can only be replaced by NA's, that add to the empty values already present in the initially imported data. Thus, a basic screening is mandatory to remove all rows containing NA's, since the analyses to follow require non-empty values for all parameters mentioned in Table 12.

The screening process is intentionally limited to this basic task of excluding rows with empty values, since we want to prevent the stronger biasing effects likely induced by the use of additional, more severe screening criteria. Indeed, we attempted, in earlier work, to apply an additional step of screening of the SC dataset using "severe criteria" identical to those used by Lavigne (2006) —which notably require the "maintenance of horizontal Dupuis flow during the test" ($s_{\mathrm{w.f}} \leq 0.5\ s_{\mathrm{w.a}}$) and a minimum test duration ($t_{\mathrm{f}} \geq 2$ h)— to evaluate the potential benefits of a more "severe screening". But instead of showing benefits, we found that this severe screening, in addition to excluding ~10,000 tests (i.e. rejecting ~60 % of the rows having no NA's), had resulted in an overall shift of the statistical distribution of the "raw" Theis-based T(SC) estimates towards markedly higher values (median $\log T$ ~ -4.0 with these conditions, compared to ~ -4.7 without) (see, e.g., Laurencelle *et al.*, 2011) (Annexe A0.2). In other words, this additional step of severe screening had induced an important bias in the main output variable of interest ($\log T$). In our view, on the one hand, such severe criteria —although commonly used for screening SC datasets— are in fact too demanding for the current purpose, considering the level of accuracy desired in the end for the T(SC) estimates. Moreover, the biasing effect of these severe criteria is likely to impair the global reliability of inferred statistics. On the other hand, we believe that the new concepts and tools presented in this paper allow a proper assessment of the reliability of T(SC) estimates without any need for such severe screening. Therefore, we strongly advise against the use of severe screening criteria prior to T(SC) estimation. Instead, plausibility of the SC test data should be checked later, by examining the output T(SC) dataset to find explanations for the unreliable T(SC) estimates. Accordingly, only a basic screening was thus applied in this case study.

Step 3: Computation and reliability assessment of T(SC) estimates

Once the input SC dataset has been prepared and screened for incomplete rows (with NA's), it is ready for T(SC) estimation, and for related assessment of the predicted reliability for the obtained T estimates. Since, for the purpose of this section, we want to compare the performance of the PC-based approach vs. the conventional Theis-based approach, an output T(SC) dataset is created for each of the two T(SC) estimation methods. Output data are obtained by carrying out the following computations for each i^{th} row of the input SC dataset (note that in the formulas below, called functions are chiefly those of the PC-based approach):

1. The T(SC) estimate is computed for the current SC data, using either estimation method, simply from: $T^{(i)} = T_{\text{est [Tb | PCb]}}\left(Q/s_{\text{w.f}}{}^{(i)}, t_{\text{f}}^{(i)}, r_{\text{w}}^{(i)}, S^{(i)}\right)$ (Equations 9 or 13).

2. Additionally, the two dimensionless ratios whose formulae do not depend on T^* are computed: $(T_{\text{Tb}}/T_{\text{PCb}})^{(i)} = (T_{\text{Tb}}/T_{\text{PCb}})\left(s_{\text{w.f}}^{(i)}, Q^{(i)}, t_{\text{f}}^{(i)}, r_{\text{w}}^{(i)}, S^{(i)}\right)$, and $ws_{\text{cr}}^{(i)} = ws_{\text{cr}}\left(s_{\text{w.f}}^{(i)}, Q^{(i)}, t_{\text{f}}^{(i)}, r_{\text{w}}^{(i)}\right)$ (Equations 16, and 17b). These ratios may be used as diagnostic tools while examining the output dataset, for example to try to identify possible correlations between these ratios and some of the other output variables.

3. The minimum estimable T^* threshold for the current SC test parameters is determined from: $T_{\text{me}}^{*(i)} = T_{\text{me}}^*\left(s_{\text{w.a}}^{(i)}, Q^{(i)}, t_{\text{f}}^{(i)}, r_{\text{w}}^{(i)}, S^{(i)}\right)$. Note that $T_{\text{me}}^{*(i)}$ is always computed using the PC-based inverse solution, as prescribed by Equation 20.

4. The simplified classification scheme proposed in Section 3.8 for inferring if T^* is theoretically estimable (TE), given the available drawdown in the well, is used. Following the instructions inherent to this simplification, the two constant constraints involved in the normal scheme are cancelled ($s_{\text{w.a.min}}$ = 0 m; $s_{\text{w.f.min}}$ = 0 m), so that the current SC test can be classified simply by comparing final vs. available drawdown in the pumped well. Accordingly, the i^{th} SC test is classified as follows: if $s_{\text{w.f}}^{(i)} \geq \left(s_{\text{w.a}}^{(i)} - \Delta\right)$, it belongs to the '< TER' class, else it belongs to the '∈ TER' class. The delta (Δ) is a tolerance margin term which is added in the inequation so that it also considers the condition of $s_{\text{w.f}}^{(i)}$ being near $s_{\text{w.a}}^{(i)}$ although slightly below (as was expressed by "$s_{\text{w.f}} \rightarrow s_{\text{w.a}}$" in Table 5 of Section 3.8). In this case study, this tolerance margin was arbitrarily set to a constant Δ = 0.5 m. The short name for the categorical variable thus created is "TE".

5. The “quantitatively reliable range” (QRR) for the current SC test parameters is computed by running an uncertainty analysis like the one described in Section 5, but with the “constant SC test parameters” (originally from Table 4) replaced by the current SC test parameters: $Q^{(i)}, t_{\mathrm{f}}^{(i)}, r_{\mathrm{w}}^{(i)}, S^{(i)}$. As detailed in Section 5.2.2, two $\log T$ values, corresponding respectively to the lower and upper bounds of the $\mathrm{QRR}^{(i)}$, are thus obtained, which may be either finite values (e.g. -5.67; denoting a closed bound), ±IND values (denoting a bound of undefined extent), or $+\infty$ (denoting a null QRR). Note that a smaller exploration range for $\log T^{*}$ is used here, compared to the default range defined earlier, in Section 5.1: [-8.1, -0.9] here, instead of [-10.1, -1.9] earlier.

6. The i^{th} estimated transmissivity is categorized into one of four enhanced classes of qualitative similarity (QS): ‘< QRR’, ‘∈ QRR’, ‘> QRR’, or ‘? (QRR = Ø)’. The three first classes come directly from the classification scheme proposed in Section 5.2.3 (but now with enhanced, more informative labels), whereas the fourth class is added here to deal with the occasional cases of “null” QRR’s, for which it is in fact unclear whether the actual transmissivity ($T^{*(i)}$) is strongly underestimated or strongly overestimated by the estimated $T^{(i)}$. The short name for the categorical variable thus created is “QS”.

7. The i^{th} SC test is further categorized according to a classification scheme made up of eight “classes of reliability” resulting from the combination of the two TE classes and the four QS classes. Such a categorization of the output data is indeed advantageous, since it greatly facilitates the post-processing and interpretation of the output data, especially when used in the preparation of the graphs (see Table 13 and the figures thereafter). The short name for this categorical variable is “QS:TE”.

8. Finally, the i^{th} estimated transmissivity is flagged as effectively “quantitatively reliable” (QR) if and only if the i^{th} test has been classified as both ‘∈ TER’ and ‘∈ QRR’.

Accordingly, the full output T(SC) dataset provided in Annexe A6.5 was created using the following structure in terms of data fields:

- echo of selected input variables: $s_{\mathrm{w.f}}$, calculated $s_{\mathrm{w.a}}$, calculated $\log(Q/s_{\mathrm{w.f}})$;
- common output fields: computed $\log T_{\mathrm{me}}^{*}$, TE (classification), computed $T_{\mathrm{Tb}}/T_{\mathrm{PCb}}$, calculated ws_{cr} ;
- output fields for each estimation method: computed $\log T$ estimate, computed QRR bounds, QS (classification), QS:TE (classification), QR (yes/no flag).

6.2 Results

The full output T(SC) dataset for this case study, obtained by carrying out the data processing workflow described above, comprises 18,313 rows and does not contain any empty value (NA) since it was generated from the input SC dataset *after* screening. An overview (sample) of the output T(SC) dataset is provided in Annexe A6.2. The full output T(SC) dataset, provided in Annexe A6.5, may also be consulted to explore the output data more thoroughly.

Table 13 below presents the classification scheme used in the preparation of the graphical results of the present section. As explained in the above workflow (step n°7), its eight "classes of reliability" are defined based on the interaction of the QS and TE categorical variables. Each class description in the table formulates the attached prediction model which is proposed for making inferences about the *actual* transmissivity ($\log T^*$). These models thus offer qualitative-only predictions for all classes but the fourth, which alone has the ability to deliver quantitative predictions for $\log T^*$.

In addition, Table 13 gives the number of SC tests falling in each class of reliability, thereby revealing that only about 55 % of the computed T(SC) estimates are predicted as being very likely quantitatively reliable (QR). Hence, about 45 % of the estimates are not, and may thus only be considered as providing qualitative information regarding $\log T^*$. Interestingly, there are very few SC tests (<0.5 %) falling in the fifth, seventh, and eighth classes of reliability, which is convenient since their attached prediction models are the weakest.

Then, the results obtained from the proposed new approach using either estimation method (Theis-based or Papadopulos-Cooper-based) are presented graphically, thoroughly compared and interpreted. Since many regional studies, especially those focused on fractured-rock aquifer systems, have reported an apparent decrease of T (or bulk permeability) with increasing depth, the graphical layout that is chosen for plotting this case study output T(SC) data consists in scatter plots of transmissivity against depth, notably to test for such a trend.

In a first stage, it is the estimated transmissivity ($\log T$) that is plotted against the well depth in the fractured-rock aquifer system (d_w), as is commonly done (Figure 24 further below). The symbols and colors used for plotting the data points are from Table 13 (right below).

Table 13: Classification scheme describing the eight classes of reliability that are used in the preparation and interpretation of the results of the Application section. This table constitutes the symbol legend for most graphs of this section. Counts per class of reliability, as obtained using either of the two T(SC) estimation methods (Theis-based or Papadopulos-Cooper-based), are also reported.

# / Symbol / Color	Definition	Description	Count (Theis)	Count (PC)
1 / ▽ /	'< QRR' and '< TER'	$\log T^* < \max(\mathrm{QRR}_{\mathrm{lowb}}, \mathrm{TER}_{\mathrm{lowb}})$ is likely: i.e. "Actual transmissivity is somewhere below the highest value between that of the QRR lower bound and that of the TER lower bound."	3031 (17 %)	2763 (15 %)
2 / ▽ /	'< QRR' and '∈ TER'	$\log T^* < \mathrm{QRR}_{\mathrm{lowb}}$ is likely: i.e. "Actual transmissivity is likely somewhere below the lower bound of the QRR."	1702 (9 %)	1508 (8 %)
3 / ○ /	'∈ QRR' and '< TER'	$\log T^* < \mathrm{TER}_{\mathrm{lowb}}$ is likely: i.e. "Actual transmissivity is likely somewhere below the lower bound of the TER."	3229 (18 %)	3517 (19 %)
4 / ○ /	'∈ QRR' and '∈ TER'	$\log T^* \approx \log T$ is very likely: i.e. "Actual transmissivity is likely close to the estimated transmissivity, which is thus deemed **quantitatively reliable (QR)**."	9900 (54 %)	10114 (55 %)
5 / △ /	'> QRR' and '< TER'	$\log T^* < \mathrm{TER}_{\mathrm{lowb}}$ is reasonably likely: i.e. "Actual transmissivity is likely somewhere below the lower bound of the TER."	1 (~0.005 %)	1 (~0.005 %)
6 / △ /	'> QRR' and '∈ TER'	$\log T^* > \mathrm{QRR}_{\mathrm{uppb}}$ is likely: i.e. "Actual transmissivity is likely somewhere above the upper bound of the QRR."	372 (2 %)	373 (2 %)
7 / × /	'? (QRR=Ø)' and '< TER'	$\log T^* < \mathrm{TER}_{\mathrm{lowb}}$ is reasonably likely: i.e. "Actual transmissivity is more probably than not somewhere below the lower bound of the TER."	35 (~0.2 %)	15 (~0.1 %)
8 / × /	'? (QRR=Ø)' and '∈ TER'	$\log T^* > \mathrm{TER}_{\mathrm{lowb}}$ is reasonably likely: i.e. "Actual transmissivity is more probably than not somewhere above the lower bound of the TER."	43 (~0.2 %)	22 (~0.1 %)

Explanation for abbreviations and symbols: QRR = quantitatively reliable range for $\log T^*$ (via $\log T$); TER = theoretically estimable range for $\log T^*$; 'lowb' and 'uppb' subscripts extract respectively the lower or the upper bound of the range; T^* = actual transmissivity, whereas T = estimated transmissivity. T(SC) estimates which are deemed quantitatively reliable (QR) more precisely imply that there is about 90 % probability that the T^* is at most five times above or below the T, i.e. that $1/5 < T/T^* < 5/1$. Note that the lower bound of the TER is, by definition, equal to the calculated $\log T^*_{\mathrm{me}}(s_{\mathrm{w.a}}, \ldots)$ value for the current available drawdown ($s_{\mathrm{w.a}}$) and SC test parameters, using Equation 20 along with the concepts presented in Section 3.8.

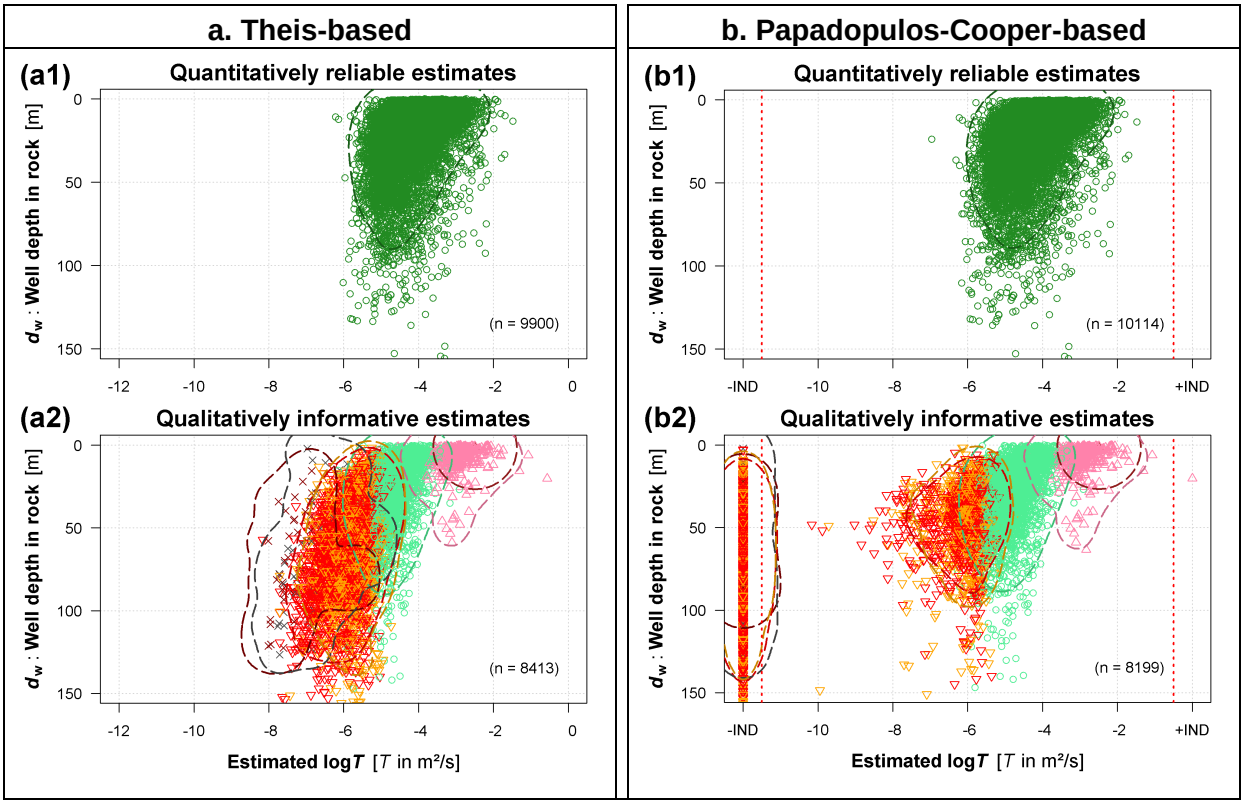


Figure 24: Scatter plots of estimated transmissivity ($\log T$) against well depth in rock (d_w). (1) Plots of the upper row show quantitatively reliable (QR) estimates only (i.e. from SC tests falling in class of reliability n°4 from Table 13). (2) Plots of the lower row show all other, non-QR yet qualitatively informative, T(SC) estimates. (a) Left column presents the Theis-based results. (b) Right column presents the PC-based results. The symbols and colors used for plotting the data points apply the classification scheme from Table 13. Dashed colored contours roughly delineate the area(s) of higher point density for each category. PC-based data points positioned at X = -12 or -0 in fact correspond to indeterminate estimates, hence the X tick marks specially labeled ±IND. The number of points selected for each plot is indicated in parentheses.

Figure 24 first reveals that many non-QR estimates (from the lower plots) fall inside the average range of the QR estimates (from the upper plots). This is in part explained by the concurrent use of the TE classification in addition to the QS classification, and also by the variability of the associated ranges (TER and QRR) which is due primarily to that of the input SC data. There are many more non-QR estimates below the range of the QR estimates than above it. In particular, a significant proportion of the estimates classified as '< QRR' (i.e. classes n°1 and n°2 of Table 13) as well as all the few estimates classified as '? (QRR=Ø)' (i.e. classes n°7 and n°8) have indeterminate low values (-IND) in the PC-based results, while they have values roughly between -8 and -5 in the Theis-based results. This demonstrates again, now in a practical context, that only the PC-based estimation method is able to detect and highlight the physical

inconsistencies hidden in the reported SC data. Moreover, apparent trends of decreasing $\log T$ with increasing d_{w} are noticed in the plotted point clouds from both estimation methods. However, since the proportion of QR estimates also decreases with depth (from ~80 % in the first meters, down to ~20 % beyond 70 meters of depth), such trends may be nothing more than misleading impressions. Indeed, the abundance of non-QR estimates —and their entanglement with the QR estimates— in the PC-based results strongly warns against making any quantitative inference for *actual* $\log T^*$ directly from the *estimated* $\log T$ data presented at this stage.

Therefore, in a second stage, the prediction models attached to the eight classes of reliability described in Table 13 are used to make quantitative and qualitative inferences about the actual transmissivity ($\log T^*$) for all tests of the dataset. These inferences are stored in a new variable which contains either values giving direct approximations for $\log T^*$ (only for the tests flagged as QR), or else values giving the lower or upper bound of the possible half-bounded range for $\log T^*$ (for all non-QR tests).

The results are presented graphically in Figure 25, where it is now the inferred indication regarding actual transmissivity ($\log T^*_{(<|\approx|>)}$: i.e. either below, around, or above the point value) that is plotted against the well depth in rock (d_{w}). Moreover, unlike in the previous figure (Figure 24a), Figure 25a is expressly prepared without distinguishing between QR and non-QR estimates to illustrate how the output T(SC) data would be treated by the conventional approach. This way, the proposed new approach —based on full implementation of the data processing workflow described in Section 6.1.2, using the PC-based estimation method— can be directly compared against the conventional approach. The colors used for plotting the data points in Figure 25 repeat those of Table 13, but alternative symbols ('<', '≈', '>') are now used to better convey the nature of these predictive indications. Precise meanings for each symbol, as well as all other details, are provided in the legend of the figure.

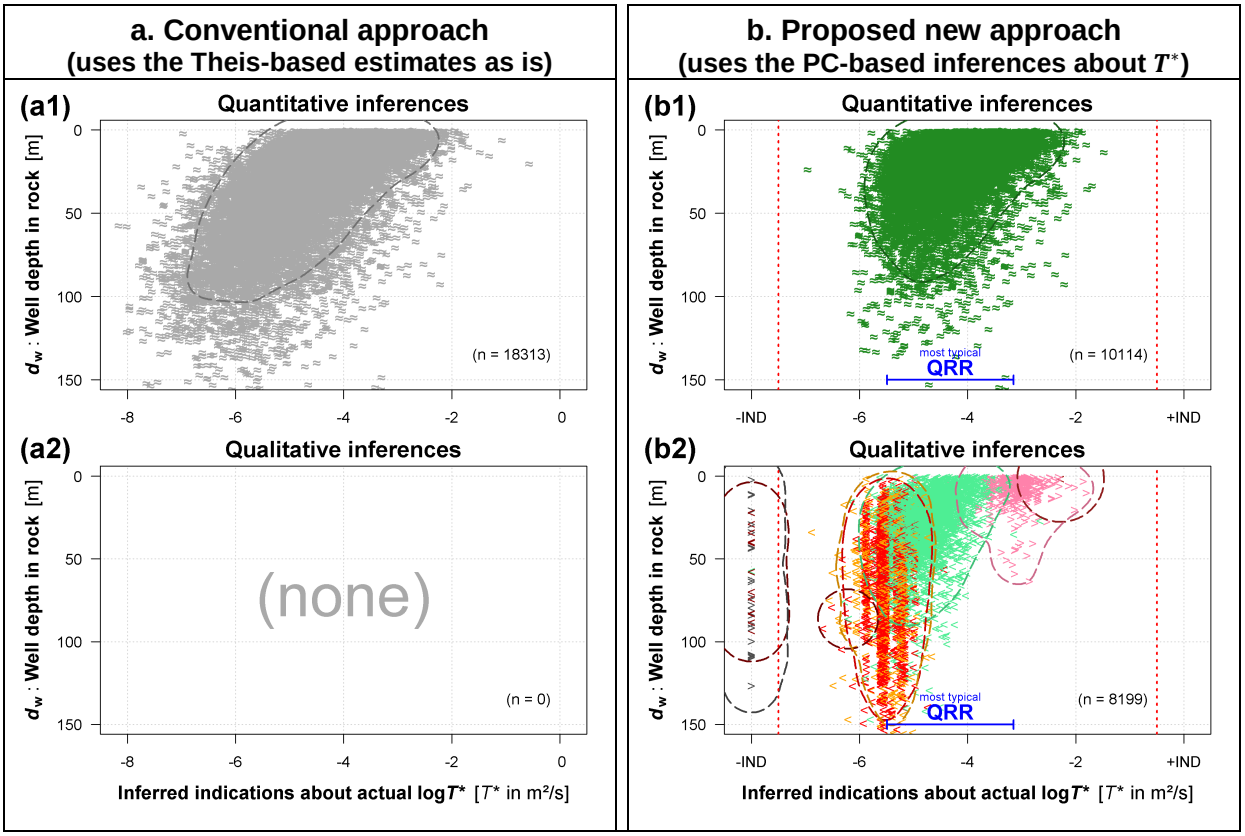


Figure 25: Scatter plots of inferred indications regarding actual transmissivity ($\log T^*_{(<|\approx|>)}$) against well depth in rock (d_w). (a) Left column presents the inferences for $\log T^*$ proposed by the conventional approach (using the Theis-based estimates as is). (b) Right column presents the mixed quantitative and qualitative inferences produced by the proposed new approach (through full application of the workflow described in Section 6.1.2, using the Papadopulos-Cooper-based estimation method). (1) Plots of the upper row show the estimates which are considered quantitatively reliable (QR) according to each approach: all tests are thus displayed in plot 'a1' (as undifferentiated gray symbols) for the conventional approach, whereas only tests effectively flagged as QR during the workflow (i.e. tests belonging to class n°4 from Table 13) are displayed in plot 'b1' (as forest-green colored symbols) for the proposed new approach. The symbol used for these quantitative inferences is '≈', indicating that X coordinates of these points are seen as readily usable approximate $\log T^*$ values according to either approach. The dashed contour delineates the area of higher point density. Conversely, (2) plots of the lower row show all qualitative indications inferred for $\log T^*$ using the prediction models provided by Table 13 for the seven non-QR classes of reliability. Each data point is positioned at the predicted upper or lower bound of the possible range for $\log T^*$, so that '<' and '>' points respectively indicate that the corresponding $\log T^*$ values are "likely somewhere below" and "likely somewhere above" the X coordinate of the points. The colors used for plotting the data points follow the scheme from Table 13. Dashed colored contours delineate the area(s) of higher point density for each category. PC-based data points positioned at X = -8 or -0 correspond to inferences with indeterminate values, hence the X tick marks specially labeled ±IND. The blue whisker illustrates the "most typical QRR" for the PC-based estimates, i.e. the same QRR that was computed in Section 5.2.2 for the typical SC test parameters from Table 4. Conversely, the forced display of an empty graph labeled "(none)" as the plot 'a2' aims to highlight the major mistake that is made in the conventional approach by assuming that every estimate is QR, and thereby stress how misleading the conventional approach actually is.

Focusing first on the results from the proposed new approach, Figure 25b shows that many qualitative $\log T^*_{(<|>)}$ inferences fall inside the average range of the quantitative $\log T^*_{(\approx)}$ inferences, similar to what was previously observed from Figure 24b. Qualitative $\log T^*_{(<)}$ inferences of class n°3 (from Table 13) are the data points that are the most entangled with the $\log T^*_{(\approx)}$ inferences. Qualitative $\log T^*_{(<)}$ inferences of class n°1 and n°2 (red and orange symbols) appear grouped about the lower end of the range of the $\log T^*_{(\approx)}$ inferences, around -5.5. Interestingly, this average $\log T^*_{(<)}$ coincides with the lower bound of the "most typical QRR" (displayed in blue, and derived from the results of the uncertainty analysis for the PC-based estimation method, in Section 5.2.2), that is, $\mathrm{QRR}_{\mathrm{lowb}} \approx$ -5.49. This specific observation hence suggests that it might be possible, in practice, to roughly approximate the "true" QRR's of most SC tests by computing just one or a few "typical" QRR's, for instance to reduce the complexity of the data processing workflow —though it remains preferable, of course, to avoid such simplification. In addition, Figure 25.b2 confirms, more explicitly than Figure 24.b2, that the vast majority of the indeterminate (-IND) estimates nonetheless provide useful qualitative indications about $\log T^*$. In this case study, the -IND estimates are indeed translated into 2,789 $\log T^*_{(<)}$ inferences (~34 % of the qualitative inferences; ~15 % of all inferences). There is also a negligible number of 36 points positioned at X = -IND in Figure 25.b2 which are actually unusable (too vague) inferences. Thus, overall, the important relative abundance of $\log T^*_{(<)}$ inferences underscores that -IND estimates should neither be screened out, nor overlooked.

Moreover, the results from the proposed new approach (Figure 25b) may be exploited to investigate the previously noticed depth trend of transmissivity. The fact that the proportion of non-QR estimates increases with depth, however, constitutes a major obstacle hindering this investigation. The following analysis illustrates the possibilities and limitations. Considering that the median is generally a good approximation for the geometrical mean of a lognormal property such as T^*, and taking advantage of the fact that the median is insensitive to the extreme values, it is possible to infer the likely geometrical mean of T^* from the median $\log T^*$ computed for the first depth intervals, within which there are more than 50 % of QR estimates. The median $\log T^*$ values thus obtained are somewhere between -4.0 and -3.8 for the 0–10 m depth interval, somewhere between -4.5 and -4.3 for the 10–20 m interval, and somewhere between -5.2 and -4.7 for the 20–30 m interval. Beyond the first 30 m of depth, the median $\log T^*$ simply cannot be inferred quantitatively, as the proportion of non-QR exceeds 50 %. In addition, as there is a non-negligible proportion of non-QR estimates at all depths, it is therefore impossible to properly assess the variability of $\log T^*$ quantitatively (e.g. through variance, standard deviation, or

percentiles far from the median) with enough confidence. On the basis of these observations, it is therefore inferred that there is very likely some decreasing trend of $\log T^*$ with increasing d_w, with an intercept probably around $\log T^* =$ -4.0 at d_w = 0 m, but with very unclear slopes beyond 30 m of depth. Nevertheless, this depth-decreasing trend of $\log T^*$, although it appears confirmed for the first 30 meters, remains totally inconsistent with the very definition of transmissivity —as the lengths of the open-hole intervals of the wells are generally about equal or at least proportional to the well depths (d_w) (see Figure 14). This puzzling problem is addressed in another paper by the same authors, which proposes the "well-drillers' sampling bias" as the likely explanation for this non-physical yet observed depth-decreasing trend in the *sample* $\log T^*$ data (Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-b) (see Chapter 7).

Furthermore, Figure 25 brings to light the misleading nature of the conventional approach. Indeed, by presenting all estimates as if they were effectively quantitatively reliable, the scatter plot of Figure 25.a1 falsely suggests that it is possible to make all kinds of statistical inferences from the displayed data… when in fact it is not. The primary reasons why the undifferentiated data points (from the conventional approach) are inappropriate for making such inferences are, firstly, that the variable in the X axis is in fact simply the estimated transmissivity ($\log T$) but disguised as if it were the actual transmissivity ($\log T^*_{(\approx)}$), and secondly, that a considerable proportion of those $\log T$ estimates are in fact *not* quantitatively reliable, contrary to what is presumed in this approach. The conventional approach, in short, ends with statistics describing $\log T$, while the real variable of interest is $\log T^*$.

The proposed new approach therefore appears as a definitive improvement over the conventional approach. Yet, how to *fully* exploit the blend of quantitative $\log T^*_{(\approx)}$ and qualitative $\log T^*_{(<|>)}$ inferences resulting from this new approach remains an open question. The challenge, from that point onwards, is to develop algorithms which are able to infer the statistical distribution that most likely represents the actual variability of $\log T^*$ by exploiting the qualitative inferences in some way. Some assumptions about the actual distribution of $\log T^*$ (lognormality, symmetry, unimodal or multimodal, …) might have to be made within these algorithms to make it possible to infer detailed statistics regarding $\log T^*$, especially at depth. Or maybe an algorithm based on sequential addition of hypothetical probability distribution functions (PDF's) for every $\log T^*_{(<|\approx|>)}$ inference could produce good results, without needing to make any such assumption. Anyhow, it is only after this question is resolved that it will be possible to fully exploit these $\log T^*_{(<|\approx|>)} - d_w$ data, notably to infer truly reliable statistics describing the depth trend and variability not only of transmissivity (T^*) but also of hydraulic conductivity (K) within the fractured-rock aquifer system.

7. Summary and conclusions

Specific capacity (SC) data are the most abundant and readily available data for inferring hydraulic properties of aquifer systems at the regional scale, yet they are of highly variable quality. SC data are indeed typically affected by measurement and reporting errors of various types, causes and magnitudes. Accordingly, transmissivity (T) estimates obtained from SC data, T(SC), are usually considered as rough "order-of-magnitude" estimates.

The overall objective of the present study was thus to assess the reliability and accuracy of T estimates derived from real and thus imperfect SC data by analytical methods, and then to show how the exploitation of these data can be improved by thoroughly considering the limited reliability of the T(SC) estimates. Two analytical T(SC) estimation methods were presented, and then compared throughout the study: the most commonly used method based on the Theis solution, and a proposed new method based on the Papadopulos-Cooper (PC) solution which accounts for the wellbore storage effect. Useful concepts emerging from the PC solution were formulated, notably that of the theoretical maximum possible drawdown in the pumped well ($s_{\mathrm{w.max}}$) for given SC test parameters, and that of a wellbore storage contribution ratio (ws_{cr}) for quantifying the significance of the wellbore storage effect in a given SC test.

In a first stage, the theoretical behavior of the two (Theis-based, and PC-based) forward solutions for predicting the drawdown in the well (s_{w}), and the two inverse solutions for estimating T from the final drawdown in the well at the end of the SC test ($s_{\mathrm{w.f}}$), was examined. The main conclusions of this exercise are the following:

- The PC-based inverse solution is able to accurately estimate any T^* without bias when the input SC data are free of errors and the final drawdown is realistic ($s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.max}}$). Conversely, it produces "indeterminate" estimates when the final drawdown is too large ($s_{\mathrm{w.f}} > s_{\mathrm{w.max}}$), indicating that the SC test is physically impossible as it is reported.
- The Theis-based inverse solution tends towards a systematic overestimation of T^* when the input final drawdown $s_{\mathrm{w.f}}$ closely approaches or exceeds the maximum value of $s_{\mathrm{w.max}}$, in particular when T^* is low, but always provides a seemingly valid estimate, thereby giving the false impression that the test is physically plausible even when the final drawdown is excessive ($s_{\mathrm{w.f}} > s_{\mathrm{w.max}}$).
- Specific capacity is not always a reasonable "direct" approximation for actual transmissivity in practice, especially when the wellbore storage effect is significant (i.e. when the calculated wellbore storage contribution ratio ws_{cr} approaches or exceeds 100 %). Since

this is quite often the case in actual SC tests (notably due to their typically short duration and high pumping rate), the commonly proposed rule of thumb stating that actual $T^* \approx Q/s_{\mathrm{w.f}}$ (e.g. in Mace, 2001) should preferably be avoided.

- The Theis-based estimation method appears as a viable option for obtaining reliable physically-consistent T(SC) estimates *only* when the wellbore storage effect is not important (i.e. ws_{cr} sensibly lower than 100 %). Specifically, the provided explanatory example set up using typical SC test parameters, has shown that the deviation between the Theis-based T(SC) estimates (T_{Tb}) and the PC-based estimates (T_{PCb}) increases in a nonlinear manner with ws_{cr}, but stays within an acceptable range (i.e. $T_{\mathrm{Tb}}/T_{\mathrm{PCb}} < 5$) approximately for ws_{cr} < 50–80 % or, using the same notation as Papadopulos & Cooper (1967), for $u_{\mathrm{w}}/\alpha < 10^{-1}$. Thereby, the condition c1 originally formulated by these authors of the PC solution ($u_{\mathrm{w}}/\alpha < 1\times10^{-3}$) as well as our alternative condition c2 ($u_{\mathrm{w}}/\alpha < 2\times10^{-2}$) both appear unduly restrictive for the specific purpose of approximate T(SC) estimation. Nevertheless, the Theis-based estimation method remains a generally misleading method, since it does not verify at all (and thus does not inform on) the physical plausibility of the SC tests, contrary to the PC-based estimation method.
- In short, it is critical that the T(SC) estimation methods take the wellbore storage effect into account. Accordingly, the new PC-based T(SC) estimation method thus appears a significant improvement over the conventional Theis-based estimation method.

Yet, this study has also brought to light, in closing the theory, that the T(SC) estimation methods, used as is, completely disregard the limited length of actual pumped wells, yet the latter necessarily implies a limited height of the water column above the pump prior to the start of the SC test, a notion which is referred to as limited "available drawdown" ($s_{\mathrm{w.a}}$).

- On that basis, a "minimum estimable T^* threshold" (T^*_{me}) notion was thus defined, then integrated into the broader concept of a "theoretical estimable range" for T^* (TER), whereby only actual $T^* > T^*_{\mathrm{me}}$ can potentially be accurately estimated.
- It was demonstrated that only the SC tests ending with a drawdown less than the available drawdown ($s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.a}}$) may, under favorable conditions, result in accurate T(SC) estimates.
- Accordingly, a first classification scheme was proposed for the SC tests, based on verification whether $s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.a}}$ or not, as a means to extract qualitative indications regarding the most probable range for actual T^*: within, or below the TER.

In a second stage, the sensitivity of the two T(SC) estimation methods to alteration of their input parameters one at a time, was investigated. The main conclusions are the following:

- A positive error in the specific capacity ($Q/s_{\mathrm{w.f}}$) or in the test duration (t_{f}) input value leads to an overestimation of the tested true transmissivity (T^*), whereas a positive error in the well radius (r_{w}) or in the aquifer storativity (S) input value leads to an underestimation of T^*, whatever the estimation method.
- The PC-based T(SC) estimation method becomes increasingly sensitive to errors in any of the three main input parameters ($Q/s_{\mathrm{w.f}}$, t_{f}, and r_{w}) as the true transmissivity (T^*) decreases and wellbore storage contribution ratio (ws_{cr}) approaches 100 %.
- Not all combinations of SC test parameters are actually physically possible, consistent with the earlier results from the first stage.
- The PC-based T(SC) estimation method appears to offer the best overall performance for T(SC) estimation, at least under ideal, error-free conditions, since it is able to infer T^* with little bias even when the wellbore storage effect is very important (e.g. when T^* is very low or ws_{cr} approaches 100 %). In contrast, the Theis-based T(SC) estimation method suffers from an important overestimation bias when T^* is very low or ws_{cr} approaches 100 %, even without any alteration (~ error) of the true input test parameters.

In a third stage, a Monte Carlo approach was implemented to investigate the uncertainties in the T(SC) estimates stemming from pervasive errors in the reported SC data. An uncertainty analysis was thus carried out for each of the two estimation methods. The main conclusions are the following:

- The Theis-based T(SC) estimation method is unlikely to produce very low T estimates, as a direct consequence of the important overestimation bias impairing that method, especially when actual T^* is low. Conversely, the PC-based T(SC) estimation method can produce T estimates across an almost unconstrained range. Specifically, given a set of numerous very low values of actual T^*, Theis-based estimates will indeed tend to gather around some floor (and overestimated) T value, whereas PC-based estimates will spread broadly and include a notable proportion of “indeterminate” estimates. This highlights the fragility of the physical consistency ($s_{\mathrm{w.f}} < s_{\mathrm{w.max}}$) requirement, which becomes increasingly sensitive to errors in the SC data as the actual T^* decreases.

- T estimates were found to be quantitatively reliable (QR) —i.e. at worst a given factor about their corresponding actual T^* values (e.g. 1/5 < T/T^* < 5/1 was used in this study)— only within a limited range of T, regardless of the estimation method, as a direct consequence of the inaccuracies in the input SC data. Thus, there is not only a lower but also an upper threshold of T beyond which the T(SC) estimates are no more QR, when the SC data contain errors.
- A second classification scheme was proposed for the SC tests, based on this "quantitatively reliable range" (QRR), whereby the T estimates are categorized into three zones of qualitative similarity ('<', '≈', '>') according to whether they are below, within, or above the QRR computed through the uncertainty analysis.
- Accordingly, T estimates falling outside the QRR, although they cannot provide quantitative approximations of T^* ('≈'), nevertheless give relevant and usable qualitative indications regarding T^* ('<' or '>').
- Furthermore, the sensitivity analysis of the QRR that is summarized in Annexe A6.3 showed that the QRR is sensitive to uncertainties in all SC test parameters but S, and confirmed that the two T(SC) estimation methods are limited by similar QRR's in general.

In a fourth and last stage, the set of notions and concepts presented in the general part of the study was put into application in a case study aiming at the hydraulic characterization of a regional fractured-rock aquifer system through T(SC) estimation from abundant SC data originally reported by well drillers. The proposed new approach for making more "aware" inferences about the actual T^* at the tested wells from both the computed PC-based T(SC) estimates and the qualitative information obtained in parallel, was thus compared, throughout this case study, against the herein-criticized conventional approach which uses the Theis-based T(SC) estimation method without taking the limited reliability of the T estimates into account. This comparison exercise has, in substance, highlighted many benefits of using the proposed new approach, while clearly disclosing many flaws within the latter. More precisely, the main conclusions and recommendations emerging from this case study are the following:

- Screening of the input SC dataset should be minimized in order to prevent the selection effect (bias) potentially induced by the use of additional, more stringent screening criteria. Plausibility of the SC test data can be verified later still, through detailed examination of the output T(SC) estimates along with the associated reliability information.

- The set of prediction models for T^* proposed in Table 13 actually constitutes a major outcome of this research. This represents an original and practical approach for making "aware" quantitative and qualitative inferences about T^* within a thoroughly consistent framework.
- The global proportion of quantitatively reliable (QR) estimates is likely limited, in practice. Results of this case study have indeed shown that only about 55 % of the computed T estimates were predicted as being very likely QR, meaning that the other ~45 % could only provide qualitative information regarding T^*.
- Indeterminate (-IND) estimates nonetheless provide useful qualitative indications about T^*, in practice. In this case study, qualitative indications obtained from such -IND estimates through the proposed new approach indeed formed ~15 % of all inferences about T^* (i.e. from all usable SC tests within the input SC dataset), thereby emphasizing that -IND estimates should neither be screened out nor overlooked.
- Low actual T^* can rarely be quantitatively estimated, primarily because of the high uncertainty pertaining to T(SC) estimation when the wellbore storage effect is important, but also as a consequence of the limited available drawdown ($s_{\mathrm{w.a}}$) in the test wells.
- Qualitative inferences about T^* not only inform on the probable range for $\log T^*$, but also do highlight the wells for which a strategic optimization of the SC test parameters (e.g., based on the findings outlined in Annexe A6.3) followed by re-running of the SC tests, may allow to obtain a QR estimate. This can benefit local-scale studies where it is especially important to have reliable T estimates for as many individual wells as possible.
- The range of possible statistical inferences about T^* is generally very limited, even at the regional scale, as revealed through the proposed new approach. In this case study, for instance, the proportion of QR estimates was shown to decrease rapidly with depth, restricting a tentative assessment of the depth trend of $\log T^*$ to the first 30 meters only.
- The key advantage of the proposed new approach, accordingly, is that it gives honest indications about the very limited reliability of the T estimates, thereby allowing one to make well-informed inferences regarding the real variable of interest, T^*.
- As for the conventional Theis-based approach: by utterly disregarding the uneven reliability of the T estimates and by further producing seemingly valid estimates even from SC data implying physical inconsistencies (i.e. $s_{\mathrm{w.f}} \not< s_{\mathrm{w.max}}$), it falsely suggests that it is possible, and even proper, to make all kinds of reliable statistical inferences from the T data, when in fact it is not. Similarly, in the view of the authors, alternative "empirical-based"

approaches using empirical relationships for T(SC) estimation likely suffer from the same flaws as the conventional approach; they are thus equally misleading, and should therefore be judged as critically as the latter.

However, notwithstanding the significant improvements brought by the proposed new approach and its featured PC-based T(SC) estimation method, there are still several limitations worth noting:

- It is rather obvious that the assumptions underlying the pumping test solutions used in the T(SC) estimation methods are almost never met in practical contexts. There are indeed many non-ideal conditions frequently observed in field testing, notably including: turbulent well losses, dewatering of water-yielding zones, unstable pumping rate, well diameter variations along the open borehole, fracture flow, wellbore skin, etc. (Risser, 2010; Houben, 2015). Yet it is conjectured that these non-ideal conditions still allow T(SC) estimation to be achieved with reasonable accuracy levels in the end, especially if the PC-based estimation method is used. Nevertheless, it would be relevant to verify if this conjecture is indeed legitimate, through comparison of the used pumping test solutions against more complex solutions that are closer to the real hydraulics behind actual SC tests. In this respect, the analytical solutions of Moench (1997) or Mishra & Neuman (2011) appear as particularly good candidates for computing more realistic $s_{\mathrm{w.f}}$ predictions.
- The representativeness of the uncertainty analysis could be strengthened through an improved understanding of how the SC tests are actually conducted in the field and how the SC data are effectively measured by the testers (mostly well drillers) —i.e. with what care about accuracy and thus what typical error magnitudes (and also possible biases) in the end. In particular, it would be especially important to make sure that the interpreted SC data come from SC tests that actually consist in short-duration pumping tests, rather than bail or air-lift (well yield) tests for instance (Driscoll, 1986).

On the whole, the concepts, the workflow, and the new approach proposed in this study should be applicable to most aquifer settings, i.e. all aquifer media which may be treated as an equivalent porous medium, although the assumptions underlying the preferred PC solution may be more or less appropriate depending on the actual aquifer characteristics. Still, the proposed new approach should lead to better inferences about actual T^* in every case, compared to the conventional and somewhat misleading Theis-based or empirical-based approaches.

8. Acknowledgements

The first author wishes to thank NSERC for their financial contribution to his PhD research project. A special thanks to Louis Laurencelle, Ph.D. (UQTR), for his help in thoroughly revising the manuscript and for his insightful comments. Many thanks also to the members of the thesis examination committee, Kent Novakowski, Daniel Paradis, Olivier Bour, John Molson, and Michel Parent, for their valuable and constructive comments. Finally, many thanks to my colleagues, Jean-Sébastien Gosselin, Pierre Masselot, Gabriel Fabien-Ouellet, and Pierre Ladevèze, for many fruitful discussions surrounding the study.

The interested reader can download the various program codes developed in the R programming language (R Core Team, 2017), that are provided in Annexe A6.4.

CHAPITRE 7 : REGIONAL-SCALE HYDRAULIC-CONDUCTIVITY VERTICAL PROFILES DERIVED FROM SPECIFIC CAPACITY TESTS IN FRACTURED ROCK AQUIFERS FREED FROM WELL-DRILLERS' SAMPLING BIAS

Titre traduit

Estimation de profils verticaux de la conductivité hydraulique dans un système aquifère rocheux fracturé d'échelle régionale à partir de données d'essais de capacité spécifique pourtant affectées par un fort biais d'échantillonnage lié aux pratiques courantes des puisatiers

Auteurs

Marc Laurencelle[1], René Lefebvre[1]

[1] Institut national de la recherche scientifique, Centre Eau Terre Environnement (INRS-ETE), 490 rue de la Couronne, Québec, Québec, Canada

Statut de la publication

A soumettre à la revue *Water Resources Research*.

Contribution de l'étudiant et du co-auteur

Marc Laurencelle a réalisé la recherche exploratoire préalable et identifié l'intérêt de traiter la problématique, puis développé la méthodologie, produit les résultats, et rédigé l'article.

René Lefebvre a suivi les travaux, apporté des contributions fondamentales au niveau des concepts et des stratégies d'abord du problème, et révisé et commenté en profondeur l'article.

Résumé

Les données de capacité spécifique (SC : de l'anglais "specific capacity"), abondantes à l'échelle d'une région puisque produites de façon routinière par les puisatiers lors de tests de performance des puits d'eau, sont généralement utilisées pour estimer la transmissivité (T) des aquifères. Les estimations de T(SC) sont ensuite couramment utilisées pour déduire des profils verticaux de la conductivité hydraulique (K_{b}) d'aquifères rocheux fracturés, qui tendent à être davantage fracturés et perméables à de faibles profondeurs, mais cela sans tenir pleinement compte de la nature imparfaite des données de T(SC). L'objectif de cette étude était ainsi de développer une méthode permettant d'exploiter les estimations de T(SC) afin de déduire des profils des propriétés de fracturation et de K_{b} représentatifs à l'échelle régionale, en tenant compte à la fois du biais d'échantillonnage lié aux pratiques courantes des puisatiers et de la fiabilité limitée des estimations de T(SC). Pour ce faire, une approche par simulation Monte Carlo a été développée. Le modèle stochastique conçu comprend deux sous-modèles: un premier pour simuler des échantillons du milieu fracturé hétérogène, et un second qui vient y forer des puits d'une manière non aléatoire reproduisant le biais d'échantillonnage par les puisatiers. Des variables aléatoires sont utilisées pour paramétrer ces sous-modèles afin de simuler la variabilité ou l'incertitude des différentes composantes du problème. Une exécution itérative du modèle stochastique permet d'obtenir de multiples réalisations de colonnes d'aquifère rocheux fracturé hétérogène, et d'ensuite simuler le biais d'échantillonnage en reconstituant le processus de prise de décisions des puisatiers quant à la profondeur à laquelle arrêter le forage en fonction de la T du trou foré en cours de forage, pour chacune des colonnes préalablement simulées.

Cette approche a été appliquée à un système aquifère rocheux fracturé divisé en trois contextes hydrogéologiques distincts. Un peu plus de 18 000 essais de capacité spécifique étaient disponibles pour cette zone d'étude de 12 500 km², située au sud-ouest du Québec (Canada). Le modèle stochastique a été calé manuellement afin de reproduire les statistiques obtenues à partir des données « observées » de la région d'étude à la fois en termes de T et de profondeur des puits selon la profondeur, d'une part, et d'ensuite déduire les profils verticaux de K_{b} et leur incertitude associée, d'autre part. Une étude paramétrique de l'influence des diverses composantes du modèle stochastique sur les résultats simulés a également été menée. Les résultats obtenus ont permis de montrer que la tendance à la décroissance de T avec la profondeur dans le roc, communément obtenue lors de l'exploitation de données de SC afin de caractériser des aquifères rocheux fracturés régionaux, est un résultat trompeur découlant du biais d'échantillonnage par les puisatiers. De plus, l'hétérogénéité des ouvertures des fractures,

et donc des transmissivités des fractures, a un impact nettement plus important sur les profondeurs de puits biaisées simulées que les diminutions, avec la profondeur, de l'ouverture moyenne des fractures ou de la densité moyenne de fractures. Ainsi, la nature non aléatoire des profondeurs des puits est contrôlée non seulement par le biais d'échantillonnage lié aux pratiques courantes des puisatiers mais aussi par l'hétérogénéité des fractures, lesquels peuvent donc être investigués et caractérisés en utilisant l'approche stochastique proposée.

Abstract

Abundant specific capacity (SC) data from well-drillers' short-duration well yield tests are commonly used to estimate aquifer transmissivity (T). Such data have been used before to infer vertical profiles of bulk hydraulic conductivity (K_{b}) in fractured rock aquifers, which tend to be more fractured and permeable at shallower depths, but this has been done without full consideration of the nature of T(SC) estimates. The objective of this research was to develop a methodology to exploit T(SC) estimates for inferring regionally representative profiles of fracture properties and K_{b}, while accounting for the limited reliability of T(SC) estimates as well as the strong sampling bias induced by the conventional practices of the well drillers. For this purpose, a Monte Carlo simulation approach was developed. The dedicated stochastic model involves two interacting submodels: one for generating fractured-rock aquifer columns (samples), and another for drilling open-hole wells in those aquifer columns in a way that imitates well-drillers' sampling bias. Most parameters of the stochastic model are defined using random variables in order to simulate the variability or uncertainty of the various components of the problem. A full run of the stochastic model provides multiple realizations of heterogeneous fractured-rock aquifer columns and then computes the transmissivity of open-hole wells that would be drilled through these columns to either purely random (unbiased) depths, or non-random depths reflecting the well-drillers' multi-criteria decision making process regarding the depths to drill the open-hole wells in each of the previously simulated aquifer columns. The workflow was applied to a fractured-rock aquifer system with three distinct hydrogeological contexts. The 12,500 km^2 study area located in southwestern Quebec, Canada, provided 18,313 specific-capacity test data. The stochastic model was manually calibrated to reproduce observed depth-wise statistics about T and drilling depths, and then to infer K_{b} profiles with depth and their uncertainty bounds. A parametric study of the influence of the various components of the fractured-rock and drilling models on the simulated results was also carried out. Results show that the depth-decreasing trend of T commonly obtained through regional-scale analysis of SC data from fractured-rock aquifer systems is definitely an artifact of

the well-drillers' sampling bias. Also, the heterogeneity of fracture apertures, and thus of fracture transmissivities, has a much larger impact on simulated biased well depths than the decrease in either average fracture aperture or fracture density. Hence, non-random well depths reflect both the well-drillers' sampling bias and the heterogeneity of the sampled arrangements of fractures, which can be deciphered through the implementation of our stochastic simulation approach.

Keywords

fractured rock aquifer; transmissivity; hydraulic conductivity; well-drillers' sampling bias; fracture properties model; Monte Carlo simulation

1. Introduction

Hydraulic conductivity (K) is a key parameter for describing aquifer systems. In particular, having a fair knowledge of the spatial variability of K is paramount for the effective development of numerical groundwater flow models allowing, for instance, assessment of groundwater flow patterns or contaminant migration.

In most regional aquifer studies, K is inferred predominantly from estimates of local aquifer transmissivity (T) obtained through interpretation of specific-capacity test (SC) data, since such data are much more abundant and readily available than time-drawdown aquifer test data (Meier *et al.*, 1999; Mace, 2001). Indeed, in many countries, governmental agencies collect and compile hydraulic information about water supply wells into public databases, which notably document the well-performance tests routinely performed by the well drillers. The SC data, which are extracted from such databases, generally include reported static and dynamic (under pumping) water levels, discharge rate, and test duration. Specific capacity is simply the discharge rate (Q) divided by the final drawdown in the pumped well at the end of the test ($s_{\mathrm{w.f}}$), thus: $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ (Kruseman & de Ridder, 1990; Wilson, 2005).

The estimation of T from SC data is generally carried out using analytical methods based on the estimation method originally proposed by Theis *et al.* (1963), that is based on the Theis nonequilibrium equation (Theis, 1935) for a well pumping in a confined aquifer (Mace, 2001). However, our recent work has shown that it is important to consider the wellbore storage effect, as well as the large uncertainties in the T(SC) estimates that stem from the pervasive errors in the reported SC data, when exploiting T(SC) estimates data (Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-

a). The wellbore storage effect is often quite important since SC tests are generally short-duration single-well pumping tests. Consideration of the wellbore storage effect is accomplished through the use of the Papadopulos & Cooper (1967) solution, which allows explicit consideration of the effect of wellbore storage. Moreover, only part of the T(SC) estimates are in fact quantitatively reliable (i.e. close to the actual T's) due to the errors in the SC data (Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-a). Bounds defining the range of the possible actual T's for a given SC test can nonetheless be calculated, in virtually all cases, as described in Laurencelle & Lefebvre (2018, in prep.-a) (see Chapter 6).

In order to assess the vertical variation of K from T estimates, the conventional approach is to simply calculate each K by dividing the estimated T by the length of the open section of the well (b_w), and then attach a vertical depth coordinate (z) determined as the depth of the middle of the open section, to each $K_{(T)}$ value (e.g. Rivard *et al.*, 2008). In many fractured rock aquifers, wells are typically open boreholes, so the depth of the well relative to the local top of bedrock (d_w) is about equal to the open section length: $d_w \approx b_w$. The conventional approach further presumes that the spatial structure of the K_T estimates is, overall, directly representative of the actual heterogeneous K field from the studied aquifer, and thereby assumes that statistical inferences about the actual K field can be made directly from analysis of the K_T, z dataset.

Based on these premises, an apparent decreasing trend of K, $K_{(T)}$, T, specific capacity, or well yield with depth (z) has often been reported in regional aquifer studies in fractured rock settings (Davis & Turk, 1964; Merin, 1992; Gustafson & Krásný, 1994; Wei *et al.*, 1995; Wallroth & Rosenbaum, 1996; Wladis *et al.*, 1997; Nastev *et al.*, 2004; Saar & Manga, 2004; Boutt *et al.*, 2010; Lavigne *et al.*, 2010; Mortimer *et al.*, 2011; Carrier *et al.*, 2013; Chesnaux, 2013; Follin & Stigsson, 2013; Kuang & Jiao, 2014; Burns *et al.*, 2015; Lefebvre *et al.*, 2015; Ranjram *et al.*, 2015; Rutqvist, 2015). The observed decreasing trend was most often interpreted as being chiefly controlled by rock weathering intensity, fracture density, and fracture aperture, following the common conception of the bedrock as showing a significant decrease in these three structural properties as a function of depth in rock.

Yet, we surmise that at least three major flaws impair the conventional approach for K(z) inference. Firstly, T estimates from SC data are, in fact, not equally reliable. Recent research indeed has revealed that T(SC) estimates have limited and highly variable precision and accuracy, notably due to the pervasive errors in the reported SC data, to the limited available drawdown in the pumped wells, and to the simplifying assumptions regarding well hydraulics inherent to the estimation method used (Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-a) (Chapter 6). In other words,

estimated T often deviates significantly from actual T. Secondly, calculation of $K_{(T)}$ directly from T is in fact plainly inconsistent with the hypothesis of an actual K(z) trend. This simplistic calculation indeed implies that the actual K is nearly constant along the open section of the well, while the K_T(z) trend says the opposite. The use of point depth (z) coordinates for spatializing the K_T data is equally improper, since it falsely suggests that the calculated K_T is a "point value" representing the K at a specific depth in the well, whereas K_T in fact remains a "depth-averaged value" related to the entire open section of the well —that is, to the depth interval from z = 0 to z = d_w. Thirdly, the T data are necessarily a strongly biased sample, since depth-wise statistical analysis of T data generally shows a decreasing trend of T with depth or, in other words, with increasing open section length, which is physically impossible owing to the strictly cumulative nature of T with increasing open section length. Indeed, T is by definition the depth-integrated K, that is, in mathematical guise: $T = \int_{z_a}^{z_b} K(z)dz$, where $b_w = z_b - z_a > 0$ m is the open section length. Accordingly, for a given aquifer system, if the wells with open section lengths of 0–10 m show an average actual T of 1×10^{-5} m^2/s for instance, the wells with longer open section lengths of 10–20 m should show an average actual T larger than (or at the very least equal to) 1×10^{-5} m^2/s. Why then do the T estimates tend, on average, to decrease as the length of the tested interval ($b_w \approx z$) increases? What phenomenon can introduce a bias so important that the depth trend of the T estimates is reversed in comparison with the necessarily increasing trend of T with increased open section length, which is predicted by theory?

Some studies have commented on this a priori inconsistent depth-decreasing trend of T estimates data (Booth, 1988; Trainer, 1988; Daniel, 1989; Loiselle & Evans, 1991; Knopman & Hollyday, 1993; Loiselle & Evans, 1995; Wladis *et al.*, 1997; Mabee, 1999; Moore *et al.*, 2002; Banks *et al.*, 2005; Lavigne, 2006; Courtois *et al.*, 2010), and exposed a very plausible explanation for it: the bias "induced by the water well drilling procedure", also termed "well driller bias" (Wladis *et al.*, 1997). According to this concept, domestic well "holes are drilled deeper in search of sufficient yields, but only to a point, after which the well owner gives up and settles for a low-yielding well", which thus results in a "high negative correlation between well depth and well yield (or specific capacity, or T or K estimates from SC data) among the domestic wells" (Knopman & Hollyday, 1993; Loiselle & Evans, 1995). In particular, Loiselle & Evans (1995) have stated that "because of the biases in the data, conclusions based on total well yields and total well depths are misleading", and that "the use of normalized well yields (yield per [unit length] of uncased well) [and hence similarly of $K_{(T)}$ data] may actually exacerbate the problems". The rationale within the three flaws stated above is thus largely supported by these studies.

Thus, the “well driller bias” entails a severe sampling bias that is mainly driven by economic and cultural factors (Loiselle & Evans, 1991; Loiselle & Evans, 1995) and is characterized by the non-randomness of the drilling depths. Accordingly, in practice, a regional dataset of T(SC) estimates generally does not constitute a representative sample of the regional-scale variability of the average depth-integrated K with depth. That would in fact still be the case even if the T(SC) estimates were perfectly precise and accurate, since this bias is not due to the limited reliability of the T(SC) estimates data.

Although the sampling bias induced by the conventional practices of well drillers has already been proposed in the literature as the most likely explanation for the depth-decreasing T trend typically observed in regional studies of fractured-rock aquifer systems, no operational methodology has yet been devised to allow proper assessment of the vertical spatial variability of bulk-rock K from T(SC) estimates data while fully accounting for the profoundly biased nature of the T(SC) estimates data. The primary objective of the present research was therefore to find how the T(SC) estimates data could be exploited to infer characteristics about the vertical spatial variability of fracture properties and of bulk-rock K throughout a regional fractured-rock aquifer system, despite well-drillers’ sampling bias and the limited reliability of the T(SC) estimates data. Secondary objectives included highlighting the characteristic symptoms and major practical implications of the well-drillers’ sampling bias, investigating the interactions among the factors behind the characteristic symptoms of well-drillers’ sampling bias, and clearly illustrating the flaws in the conventional approach for bulk-rock K(z) inference from T(SC) estimates data.

The following tasks had to be achieved to meet the primary and secondary objectives:

- Development of a conceptual model relating T(SC) estimates, obtained from well testing over entire open-hole sections of water wells, to vertical profiles of bulk-rock K:
    - First, the conceptual model has to clarify the fundamental difference between T estimates derived from large versus small test intervals;
    - Second, the conceptual model must demonstrate how the T of a well having a large open section in rock actually relates to the depth-varying bulk-rock K, and thus to the arrangement and properties of the fractures connecting to the well;
    - Third, the conceptual model must rationalize the well-drillers’ sampling bias necessarily affecting large-interval T(SC) estimates in open boreholes, especially through determination of the factors and criteria leading to the decision by the well driller to stop the drilling at a particular depth in the fractured rock aquifer.

- Development of a convenient stochastic modeling framework enabling assessment of the vertical spatial variability of bulk-rock K from biased T(SC) data of limited reliability.
- Implementation of the developed stochastic modeling workflow to the regional-scale hydraulic characterization of an actual fractured sedimentary-rock aquifer system.

2. Problem conceptualization

The problem conceptualization is progressively developed with the aim of illustrating the causal relationships between the various components of the problem. First is presented an idealized representation of the typical field setting in which specific capacity tests (SC) are carried out. Second, the conceptualization describes the key problem of the characteristic decreasing trend of well transmissivity (T_w) with increasing depth in rock (d_w) that is commonly observed when analyzing $T_\mathrm{w}, d_\mathrm{w}$ data. Third, it is explained how the transmissivity of an open borehole, T_w, actually relates to the transmissivity of the intersected fractures in addition to that of the rock matrix, thereby confirming the strictly depth-increasing nature of T_w at the well scale. Finally, fourth, the reference vertical profiles used to model the depth-dependent trends in the arrangement and properties of the fractures are described. These vertical arrangements of highly variable fracture properties allow the assessment of the corresponding vertical spatial variability of bulk-rock hydraulic conductivity (K_b). Note that the rationale underlying this conceptualization is to infer statistical information about T_w, d_w, and K_b, at the regional rather than individual level. The biased $T_\mathrm{w}, d_\mathrm{w}$ data are exploited strictly at the sample level (through statistical analyzes). Thus, although each value of T_w, d_w, or K_b, contributes to the final outcome, the individual values are deemed practically useless.

2.1 Well transmissivity estimates derived from specific capacity tests

Figure 26a sketches the idealized geometry for an open-hole water well drilled in a fractured rock aquifer overlain by a confining aquitard and presents the set of parameters that are relevant for T(SC) estimation and then for effective implementation of the methodology proposed in this paper. But Figure 26 also specifies the vertical coordinate system that is adopted throughout this paper, which uses the top of the rock aquifer as its origin (= 0), and increases downward (i.e. with depth). One of two different vertical coordinate variables is used: 1) z is used for relating a depth-

dependent property or a phenomenon to a particular depth, whereas 2) d is used for relating a depth-integrated property, such as well transmissivity, to the interval of integration which length is in this case equal to the open-hole section length (= b_w) and is thus also about equal to well depth (≈ d_w) since the coordinate variable d uses the top of the rock aquifer as its origin. Now back to the main point of Figure 26, the idealized well has the shape of a vertical cylinder of constant non-negligible radius r_w, extending from the local ground level (= z_{ground}) to the well bottom (= z_{wbot}). The wellbore is cased through the aquitard only; the lower portion of the wellbore is uncased and thus open to the fractured rock aquifer, along an open-hole section of length $b_w \overset{def}{=} z_{wbot} - 0$, where the 0 term simply indicates that the usually small portion of cased wellbore ending in the rock aquifer is intentionally neglected. The well depth relative to the local top of the rock aquifer, similarly, is defined by $d_w \overset{def}{=} z_{wbot}$. For the sake of simplicity, the expression "well depth" represents the "well depth in the rock aquifer" for the remainder of the paper. The parameters d_w and b_w are therefore considered effectively equivalent in this study.

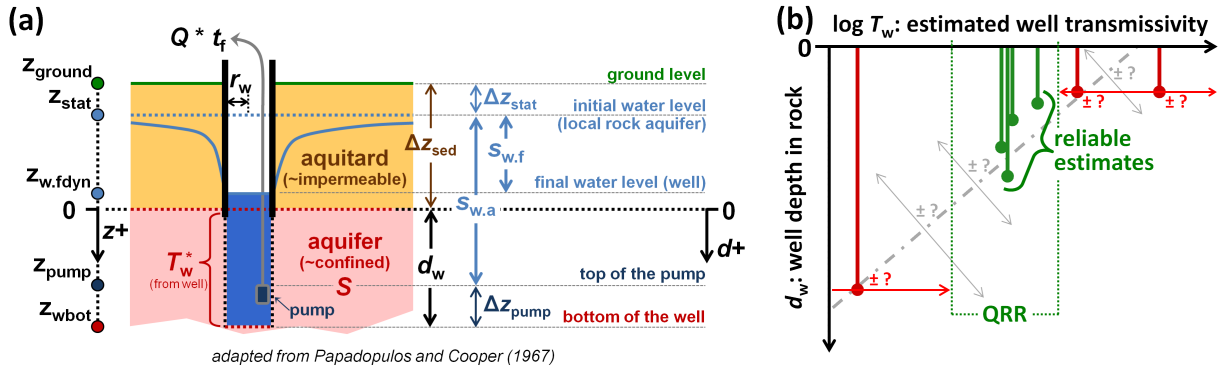


Figure 26: Well transmissivity estimates derived from specific-capacity test results. (a) Schematic representation of the drawdown in and around a pumped open-hole water well drilled in a fractured rock aquifer, at the end of a specific capacity (SC) test (adapted from Papadopulos & Cooper, 1967); (b) Illustrative $\log T_w$ estimates derived from reliability-aware interpretation of SC test results (Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-a): example of a small biased sample. Only the T(SC) estimates that are determined as quantitatively reliable (QR) are drawn in green; the others, which are at best qualitatively informative, are drawn in red with whiskers indicating their large ranges of uncertainty. QR estimates de facto concentrate within a limited "quantitatively reliable range" of $\log T_w$, hence the label 'QRR' for that intermediate interval (Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-a) (Chapter 6). The gray dash-dot line corresponds to the simplistic depth trend that is obtained from direct (reliability-unaware) analysis of the point raw coordinates, here through linear regression. The gray whiskers along the trend line underscore the high uncertainty pertaining to such raw trend.

Prior to the specific capacity (SC) test, the initial water level in the control well ideally is static, i.e. in equilibrium with the hydraulic head in the aquifer (= z_{stat}), which is assumed to be locally

uniform. Pumping water from the well at a constant rate Q_{p} for a duration of t_{f} then causes the water level in the well to drop down to a final dynamic level ($= z_{\mathrm{w.fdyn}}$). The resulting final drawdown in the pumped well at the end of the SC test is thus given by: $s_{\mathrm{w.f}} \overset{\text{def}}{=} z_{\mathrm{w.fdyn}} - z_{\mathrm{stat}}$. Available drawdown in the pumped well ($s_{\mathrm{w.a}}$) is defined as the height of the water column above the pump in the well at test start, that is: $s_{\mathrm{w.a}} \overset{\text{def}}{=} z_{\mathrm{pump}} - z_{\mathrm{stat}}$. As the pump cannot work when $z_{\mathrm{w.fdyn}} \geq z_{\mathrm{pump}}$, it is thus expected that $s_{\mathrm{w.f}} \leq s_{\mathrm{w.a}}$ throughout the SC test, whatever the pumping rate and the test duration.

Moreover, three complementary "Δz…" vertical distances are defined in Figure 26a: 1) the distance between the pump and the bottom of the well ($\Delta z_{\mathrm{pump}} \overset{\text{def}}{=} z_{\mathrm{wbot}} - z_{\mathrm{pump}}$), 2) the local thickness of the unconsolidated sediments overlying the rock aquifer ($\Delta z_{\mathrm{sed}} \overset{\text{def}}{=} 0 - z_{\mathrm{ground}}$), and 3) the local depth of the static water level relative to the ground ($\Delta z_{\mathrm{stat}} \overset{\text{def}}{=} z_{\mathrm{stat}} - z_{\mathrm{ground}}$). These Δz variables are considered mainly because they shall be used in the stochastic modeling workflow for the dynamic update (recalculation) of both the available drawdown ($s_{\mathrm{w.a}}$) and the total length of the drill hole (Δz_{dh}) throughout the drilling of each well, based on the following equations:

$$s_{\mathrm{w.a}} \overset{\text{def}}{=} z_{\mathrm{pump}} - z_{\mathrm{stat}} = \left(d_{\mathrm{dh}} - \Delta z_{\mathrm{pump}}\right) - \left(-\Delta z_{\mathrm{sed}} + \Delta z_{\mathrm{stat}}\right) \tag{23a}$$

$$\Delta z_{\mathrm{dh}} \overset{\text{def}}{=} d_{\mathrm{dh}} - z_{\mathrm{ground}} = d_{\mathrm{dh}} - \left(-\Delta z_{\mathrm{sed}}\right) \tag{23b}$$

where d_{dh} is the evolving depth in rock of the drill hole during the drilling.

Furthermore, Figure 26a highlights that the transmissivity best describing the radial flow to the well during pumping, simply called "actual well transmissivity" (T_{w}^{*}) throughout this paper, is a depth-integrated property controlled by the variable hydraulic conductivity of the rock interval open to the well (i.e. over $z \in [0,\ z_{\mathrm{wbot}}]$), and the well geometry. T_{w}^{*} is therefore naturally linked with b_{w}, and thus equally with d_{w} —hence the bracket relating the T_{w}^{*} symbol to the open-hole section in the sketch. Conversely, the storativity of the rock aquifer (S) is assumed to be locally uniform (around the pumped well), so that S can be determined independently of b_{w} and d_{w} (i.e. of the well geometry), for instance based on a priori knowledge about the local degree of confinement of the rock aquifer.

In practice, however, since the actual well transmissivity (T_{w}^{*}: with a superscript asterisk) cannot be determined exactly, it is rather approximated. T_{w} estimates (with no superscript asterisk) can be readily obtained from interpretation of reported SC data using an analytical T(SC) solution of

the form $T_{\mathrm{w}} = T_{\mathrm{est}}(Q/s_{\mathrm{w.f}}, t_{\mathrm{f}}, r_{\mathrm{w}}, S)$ (e.g. in Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-a). For the specific purpose of T(SC) estimation, it is assumed that the vertical portion of rock aquifer hydraulically responding to pumping is limited to the depth interval of the idealized open-hole section of the pumped well ($z \in [0,\ z_{\mathrm{wbot}}]$), and then that the slice of rock aquifer thus defined can be viewed effectively as an infinite, homogeneous, isotropic, fully saturated, fully confined aquifer of uniform thickness ($= b_{\mathrm{w}}$). Although these theoretical assumptions appear utterly contradictory with the heterogeneous nature of fractured rock media, they are required in practice —and most often successful— for the derivation of T_{w} estimates from SC data. To obtain such T_{w} estimates, the estimation method recently developed by Laurencelle & Lefebvre (2018, in prep.-a) provides more reliable results than does the commonly used Theis *et al.* (1963) estimation method, and more importantly it can detect incoherent SC data that do not allow a reliable T(SC) estimate. Actually, the estimation method proposed by Laurencelle & Lefebvre (2018, in prep.-a) is based on the Papadopulos-Cooper (PC) solution (Papadopulos & Cooper, 1967) and thus explicitly considers the effect of wellbore storage (see Chapter 6).

Moreover, under real conditions, T_{w} estimates frequently deviate from the actual T_{w}^{*} values they attempt to approximate, since the interpreted SC data are unavoidably imperfect, being affected by various errors. In that respect, Laurencelle & Lefebvre (2018, in prep.-a) have demonstrated: i) that "low actual T_{w}^{*} can rarely be accurately estimated, primarily because of the high uncertainty pertaining to T(SC) estimation when the wellbore storage effect is important, but also as a consequence of the limited available drawdown ($s_{\mathrm{w.a}}$) in the test wells"; ii) that T_{w} estimates derived from SC data are in fact quantitatively reliable only within a limited range of T_{w}; and iii) that the still commonly used Theis-based conventional approach for T(SC) estimation is generally misleading because it treats the T_{w} estimates as if they were all effectively quantitatively reliable, which is not the case, and should thus be avoided in favor of a more robust approach properly distinguishing "quantitatively reliable" (QR) from "qualitatively informative only" (non-QR) T_{w} estimates, the latter approach providing a blend of quantitative and qualitative indications about actual T_{w}^{*} that are inferred more reliably using the PC-based estimation method (see Chapter 6).

The conceptual results in Figure 26b illustrate how $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates obtained from processing of a real SC dataset tend to distribute as a function of well depth in rock (d_{w}). For each well, the points in the graph represent the raw $\log T_{\mathrm{w}}$ estimate tied to the borehole end depth. They are connected to the top X-axis (d = 0) by straight vertical segments representing the open-hole sections of the wells through the fractured rock aquifer, in order to underscore once again that $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates characterize large depth intervals coincident with the uncased open-hole

sections, rather than short depth intervals, in the rock aquifer. The green vertical dotted lines represent the lower and upper bounds of the “quantitatively reliable range” (QRR) for the $\log T_w$ estimates as defined by Laurencelle & Lefebvre (2018, in prep.-a) (Chapter 6). Accordingly, only the $\log T_w$ estimates falling inside the QRR can be expected to be accurate enough estimations of the actual $\log T_w^*$ values. Conversely, $\log T_w$ estimates falling outside the QRR are not quantitatively reliable, yet they are nevertheless useful as they provide qualitative indications about $\log T_w^*$. Indeed, as illustrated by the red whiskers added to the three red points, a $\log T_w$ value falling below the QRR informs that the actual $\log T_w^*$ is most likely “indefinitely lower than the lower bound of the QRR”, whereas a $\log T_w$ value falling above the QRR informs that the actual $\log T_w^*$ is most likely “indefinitely higher than the upper bound of the QRR” (Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-a). These notions will be especially involved in the second step of the proposed workflow, which aims at the preparation of quantitatively reliable statistics for $\log T_w^*$ from the $\log T_w$ estimates data and one global QRR (see Section 3.1, Step W2).

A decreasing trend of $\log T_w$ with increasing d_w such as the one shown in Figure 26b is actually a very common observation when analyzing the depth dependency of large sets of T(SC) data inferred from public regional databases. In most practical applications, however, the trend of $\log T_w$ with d_w is not as plain nor simply-linear as the one shown in Figure 26b, notably due to the important scatter of the $\log T_w$, d_w point cloud, which often hinders direct visual interpretation while weakening the correlation, and of course also because of the greater complexity behind $\log T_w$ data derived from real SC datasets (Nastev *et al.*, 2004; Lavigne *et al.*, 2010). Therefore, in practice, the depth trend is generally assessed through nonlinear or monotonic regression.

2.2 Vertical profiles for well transmissivity and well density: biased vs. unbiased sampling

This subsection of the problem conceptualization aims to illustrate the impact of the bias induced by drilling practices seeking to maximize well productivity, on the vertical spatial variability of T. This section underscores the major differences between vertical profiles obtained from statistical analysis of a biased sample (the usual case in practice) versus those that would be obtained from statistical analysis of an unbiased sample (acquired through simulation). Examples are provided of vertical profiles reporting either the distribution of well depths, or the depth-varying central tendency for actual well transmissivity ($\log T_w^*$), as a function of well depth in rock (d_w) (Figure 27). The parameters considered are therefore effectively limited to $\log T_w^*$ and d_w. In order to efficiently characterize the vertical distribution of well depths within the fractured rock aquifer, the concept of

"well density" is introduced. Well density (wd) is defined as the proportion of wells ending at depths falling within a given fixed depth interval.

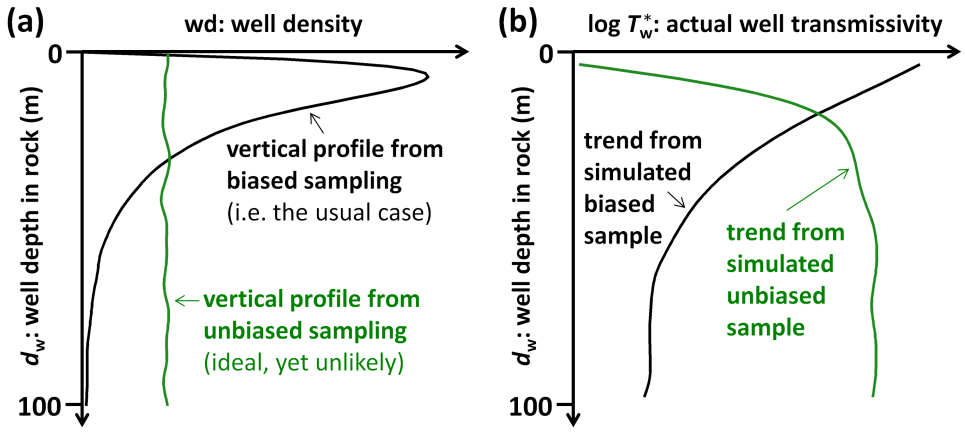


Figure 27: Main differences between vertical profiles of well density (wd) and average actual well transmissivity ($\log T_w^*$) obtained from biased versus unbiased depth sampling of the rock aquifer system. (a) Contrasted vertical profiles of well density: the "biased sampling" scenario (black curve) implies non-random drilling depths as a direct consequence of the conventional practices of the well drillers relative to desired well yield versus costs, whereas the "unbiased sampling" scenario (green curve) here involves uniformly distributed drilling depths that would have been defined prior to drilling (in a purely random way). (b) Differences between depth trends of average well transmissivity, depending on the nature of the sample data used. The black curve illustrates the rapidly-decreasing depth trend that is typically obtained from a real, and thus necessarily biased, regional-scale sample. The green curve, differently, exemplifies the depth-increasing trend that would most likely be obtained through trend analysis of a high-quality unbiased sample from that same rock aquifer system (e.g., as is done in Annexe A7.5).

Figure 27a illustrates the contrast in the vertical distribution of well depths between a biased sampling of the rock aquifer system at non-random depths, which is the sampling mode behind the T_w, d_w data from most public databases in practice, and an effectively unbiased sampling of the rock aquifer system at purely-random depths, which is more of a theoretical sampling mode. A first characteristic symptom of well-drillers' sampling bias is thus revealed: the distribution of well depths as a function of depth in the rock aquifer observed from a biased sample is not uniform; it rather tends to take the form of a positively skewed bell-shaped curve, indicating that wells were preferentially drilled within shallow depths in rock. In the framework of a regional aquifer study, detecting significant non uniformity (and, better still, positive skewness) in the calculated $\mathrm{wd}(d_w)$ profile remains a very reliable indication that the sampling is effectively biased, since it is highly likely that the numerous well drillers who have been involved in the drilling and testing of the rock aquifer system would have sought to maximize well yields versus drilling costs through efficient

optimization of open borehole lengths, as accounted for in the concept of “well-drillers’ sampling bias” discussed earlier. Furthermore, the black curve illustrating the $\mathrm{wd}(d_\mathrm{w})$ profile “from biased sampling” was forced to start from coordinates (d_w = 0, wd = 0), in order to clearly highlight that the well depths are always positive (d_w > 0 m) since the wells are, by definition, all drilled to the rock aquifer. In comparison, the green curve depicts a uniform (even) vertical distribution of well depths in rock which constitutes an ideal truly unbiased sample, yet still on the strict condition that the d_w values have been decided prior to drilling. However, such a purely-random sampling procedure is unworkable in practice, especially at the regional scale, since regional aquifer studies have no alternative but to rely mainly on existing data —mostly SC test results reported by well drillers— which are, by their very nature, consistently biased and unevenly distributed with depth.

Figure 27b first exposes the profound difference between depth trends of actual well transmissivity ($\log T_\mathrm{w}^*$) obtained from biased versus unbiased sampling. The depth trend of $\log T_\mathrm{w}^*$ obtained from analysis of a biased sample decreases rapidly with depth (note the log scale used for T_w^*) as previously stated. Conversely, the depth trend of $\log T_\mathrm{w}^*$ obtained from analysis of an effectively unbiased sample is strictly increasing with depth. This illustrates the fact that only a depth trend of $\log T_\mathrm{w}^*\,(d_\mathrm{w})$ built from a virtually unbiased, large and high-quality sample of $\log T_\mathrm{w}^*, d_\mathrm{w}$ data may possibly be representative of the “true” average trend of well-independent $\log T^*\,(d)$ in the rock aquifer system. A second characteristic symptom of well-drillers’ sampling bias is thus clearly underscored: biased sampling of a rock aquifer system almost inevitably leads to a depth-decreasing trend of $\log T_\mathrm{w}^*$ that is antithetical to the strictly increasing “true” depth trend properly describing the overall depth trend of $\log T^*$ for the entire rock aquifer system.

In summary, a $T_\mathrm{w}^*, d_\mathrm{w}$ dataset shall constitute an effectively biased sample as soon as well depths (d_w) were “optimized” during drilling (e.g. relative to yield and cost) rather than having been decided beforehand (prior to drilling). Such a biased sampling procedure also typically leads to a positively skewed bell-shaped vertical distribution of well depths and, more significantly, translates into a rapidly decreasing $\log T_\mathrm{w}^*\,(d_\mathrm{w})$ trend.

2.3 Influence of productive fractures on drilling operations

Figure 28a outlines the conceptualization of the fractured rock medium near vertical wells through seven notional wells drilled in random arrangements of fractures.

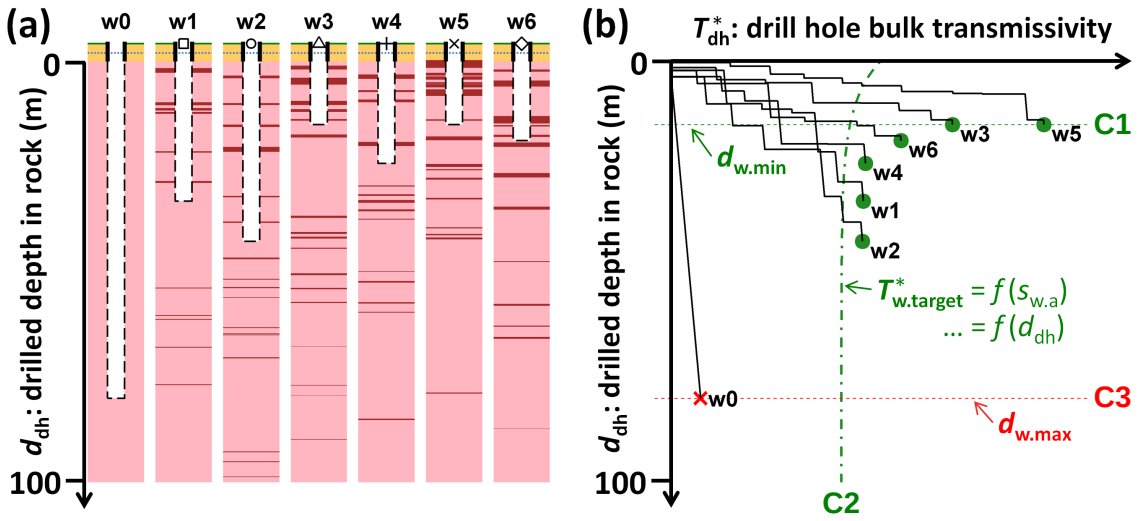


Figure 28: Influence of fractured medium heterogeneity on transmissivity (controlling well yield) and thus water-well drilling depth. (a) Fractures and rock matrix partly intersected by the open-hole section of seven notional wells; (b) Contrasting vertical profiles of drill hole bulk transmissivity (T_{dh}) expected during drilling of these seven notional wells. The dashed green curve represents the target transmissivity ($T^*_{w.target}$), which expresses the criterion 'C2' explained below in the text. The dotted horizontal green and red lines represent respectively the minimum ($d_{w.min}$) and maximum ($d_{w.min}$) well depths, i.e. the other two criteria explained below: 'C1' and 'C3'.

The wells are illustrated as blank rectangles with solid upper and dashed lower borders respectively delineating the cased and open-hole (uncased) sections of the wells. It is assumed that all of the hydraulically-active fractures can be treated as if they were horizontal parallel-plate fractures, and that groundwater flow to the pumped well is essentially radial (Witherspoon *et al.*, 1980). Hydraulic conductivity of the rock matrix (K_m) in between fractures is assumed to be isotropic, and locally homogeneous. It is further assumed that the hydraulic aperture is uniform within an individual fracture, but varies from one fracture to another. Accordingly, in Figure 28a, fractures are drawn as horizontal red lines, the thickness of which depends on their individual hydraulic aperture. The rock matrix is represented by the light red fill color, while the unconsolidated sediments overlying the rock aquifer are represented by the light orange fill color. Thus, Figure 28a exemplifies that fractures with very variable arrangements and apertures are cut through, or in other words sampled, by each different open-hole well drilled in rock. In this particular example, notional wells w_1 to w_6 thus sample typical fracture arrangements, whereas the leftmost well, w_0, instead represents the extreme case of a largely unsuccessful water well drilled to a final depth of 80 m in rock without encountering any hydraulically-active fracture.

Figure 28b illustrates how the drill hole bulk transmissivity (T^*_{dh}) is predicted to grow with drilled depth in rock (d_{dh}), as the drilling progresses and more fractures and more of the rock matrix are in contact with the open hole. The broken black lines show the vertical profiles of $T^*_{\mathrm{dh}}(d_{\mathrm{dh}})$ for the same seven notional wells. The subvertical segments of the profiles denote the small but continuous contribution of the unfractured rock intervals —limited by the poor hydraulic conductivity of the rock matrix— whereas the horizontal segments reveal the far more important and localized contribution of encountered fractures, to the total transmissivity of the drill hole. The point symbols at the end of the broken lines indicate the depths in rock at which the wells were finally drilled ($d_{\mathrm{dh}} = d_{\mathrm{w}}$: Y-axis), and the associated total cumulated bulk transmissivities ($T^*_{\mathrm{dh}} = T^*_{\mathrm{w}}$: X-axis). Equation 24 formalizes the concept of T^*_{dh} build-up as the drill hole is deepened:

$$T^*_{\mathrm{dh}}(d_{\mathrm{dh}}) = K_{\mathrm{m}} d_{\mathrm{dh}} + \sum_k T^k_{\mathrm{f}} \left[z^k_{\mathrm{f}} \leq d_{\mathrm{dh}} \right] \tag{24}$$

where T_{f} and z_{f} respectively stand for transmissivity and depth of fractures connecting to the drill hole defined by its current depth in rock d_{dh} —hence the logical condition inside square brackets following the Iverson bracket notation— and k is the fracture index. The strictly increasing nature of $T^*_{\mathrm{dh}}(d_{\mathrm{dh}})$ in both Figure 28b and Equation 24 thus clearly illustrates the cumulative nature of well transmissivity (T^*_{w}) on an individual well basis, whatever the sampling mode.

Figure 28b also depicts how the drillers' multi-criteria decision-making process regarding the final depth for an open borehole is conceptualized. The following three criteria, numbered from C1 to C3, are proposed by the authors to summarize (and later to simulate) the decision process:

C1. The total length of the drill hole (Δz_{dh}) —not only in the rock aquifer but also across the overlying unconsolidated sediments hence $\Delta z_{\mathrm{dh}} = d_{\mathrm{dh}} + \Delta z_{\mathrm{sed}}$ as given by Equation 23b— must be long enough so that the wellbore in itself can provide sufficient water storage capacity, while ensuring the cost effectiveness of the drilling operation. This effectively translates into a criterion of minimum drill hole depth within the rock aquifer: $d_{\mathrm{dh}} \geq d_{\mathrm{w.min}}$ (illustrated by a green dotted horizontal line in Figure 28b). The criterion C1 will play an active role in the frequent cases when the rock aquifer medium shows high permeability, due to productive fractures, at shallow depths (within $0 < z < d_{\mathrm{w.min}}$).

C2. The drilling can be stopped once the estimated productivity of the drill hole at its current depth, $T^*_{\mathrm{dh}}(d_{\mathrm{dh}})$, has reached or exceeded the minimum target for the well transmissivity ($T^*_{\mathrm{w.target}}$) determined by the driller as necessary to ensure that the completed well will

fully respond to the regular (daily) groundwater supply needs of the client while maintaining its dynamic water level (z_{dyn}) at a safe distance above the pump level (z_{pump}). The $T^*_{\mathrm{w.target}}$ is in fact progressively lowered as the drilling progresses, because by being longer, the drill hole provides a larger potential water storage capacity (quantified through the "available drawdown": $s_{\mathrm{w.a}} = d_{\mathrm{dh}} + \ldots$, fully defined in Equation 23a), which will make it acceptable for the z_{dyn} to fluctuate more widely in the completed well, as a consequence of the periodic pumping to meet the daily demand in groundwater. According to aquifer test theory (e.g. Papadopulos & Cooper, 1967), the lower the T^*_{w}, the larger the drawdowns in the pumped well (s_{w}). In short, the above translates into a criterion of depth-varying minimum drill hole transmissivity: $T^*_{\mathrm{dh}}(d_{\mathrm{dh}}) > T^*_{\mathrm{w.target}}(d_{\mathrm{dh}})$, prompting for the pursuance of the drilling until the criterion is met.

C3. Due to a maximum drilling cost limitation, the drilling is stopped in any case when the pre-agreed maximum acceptable depth to drill ($d_{\mathrm{w.max}}$) is reached without having attained the desired level of well productivity. This translates into a criterion of maximum drill hole depth in rock: $d_{\mathrm{dh}} \leq d_{\mathrm{w.max}}$ (illustrated by a red dotted horizontal line in Figure 28b). The resulting well still generally provides some usable productivity, except if the drill hole transmissivity (T^*_{dh}) is especially low (e.g., as in notional well w_0).

Thus, there are two possible outcomes to the drilling operation. The completed well can provide either a satisfying productivity (if criterion C2 was decisive: $T^*_{\mathrm{w}} \geq T^*_{\mathrm{w.target}}$) or else an unsatisfying yet potentially usable productivity (if criterion C3 was decisive: $d_{\mathrm{w}} = d_{\mathrm{w.max}}$, but $T^*_{\mathrm{w}} < T^*_{\mathrm{w.target}}$). Accordingly, among the notional examples in Figure 28b, all wells but w_0 show a satisfying productivity (hence the green point symbols for wells w_1 to w_6, versus the red cross for well w_0), and the criteria that effectively controlled the final depths for the wells are respectively: C1 for w_3 and w_5; C2 for w_1, w_2, w_4, and w_6; and C3 for w_0. Note, however, that in a practical context the threshold values involved in criteria C1–C3 will vary from one well to another, contrary to what is suggested by the current notional examples. Overall, Figure 28b thus clearly highlights the primary role of the drillers' multi-criteria decision-making process in causing rapidly decreasing T^*_{w} depth trends, through "biased sampling" at plainly non-random drilling depths, while also illustrating how the large variations in T^*_{w} are actually due to both the well-drillers' sampling bias and the pervasive heterogeneity of the sampled arrangements of fractures (Snow, 1969).

2.4 Models of fracture density and properties, and resulting bulk-rock hydraulic conductivity

This subsection of the problem conceptualization describes how depth-varying fracture density, fracture properties, and resulting bulk-rock hydraulic conductivity are modeled in the Monte Carlo simulation workflow. This conceptualization is closely based on the work of Jiang *et al.* (2010) who derived semi-empirical equations to describe the systematic decreasing trend of fracture aperture (b_{f}), fracture transmissivity (T_{f}), and bulk-rock hydraulic conductivity (K_{b}) with increasing depth in fractured rock media, while considering a fully empirical equation to model the overall decreasing trend of fracture density (fd) with depth in rock (z). However, unlike what was done by Jiang *et al.* (2010), heterogeneity of the fracture properties is explicitly considered in the present study, with the consequence that assessment of the vertical spatial variability of K_{b} here requires stochastic simulations and statistical analyses. Differences between the stochastic approach used in the present study and the deterministic approach of Jiang *et al.* (2010) to assess the spatial variability of K_{b} are described in more details below.

(a) Fracture density with depth

A depth-decreasing fracture density $\mathrm{fd}(z)$ relationship is considered for describing the average distribution of fractures with depth in the shallow rock aquifer (Figure 29a). Many studies have indeed observed that rock aquifers of various types tend to be much more fractured near ground level (or the rock aquifer subcrop) than deeper, notably crystalline aquifers (Johnson, 1999; Wyns *et al.*, 2004; Boutt *et al.*, 2010), and sedimentary-rock aquifers (Rushton & Rao, 1988; Merin, 1992; Arihood, 1994; Allen *et al.*, 1997; Mortimer *et al.*, 2011; Ladevèze *et al.*, 2013; Ladevèze *et al.*, 2018) (and see also Figure 34 from the case study, in Section 4.2). The denser fracturation of the shallow bedrock is generally thought of as being mostly the result of long-term uplift (Price, 1966), mechanical stress relief (lithostatic decompression) due to surface processes such as erosional or postglacial unloading (Greenbaum, 1992; Neuzil, 1995; Talbot, 1999; Mortimer *et al.*, 2011; Neuzil, 2012), and continuous weathering of the rock mass (Acworth, 1987; Wright, 1992; Wyns *et al.*, 1999; Lachassagne *et al.*, 2001; Wyns *et al.*, 2004; Wyns *et al.*, 2015) (Zhang & Sanderson, 1996). Yet, it remains partly unclear in the literature whether all of these processes actually have the ability to create new fractures, or rather just to reactivate (re-open) pre-existing fissures in the rock (Earnest & Boutt, 2014).

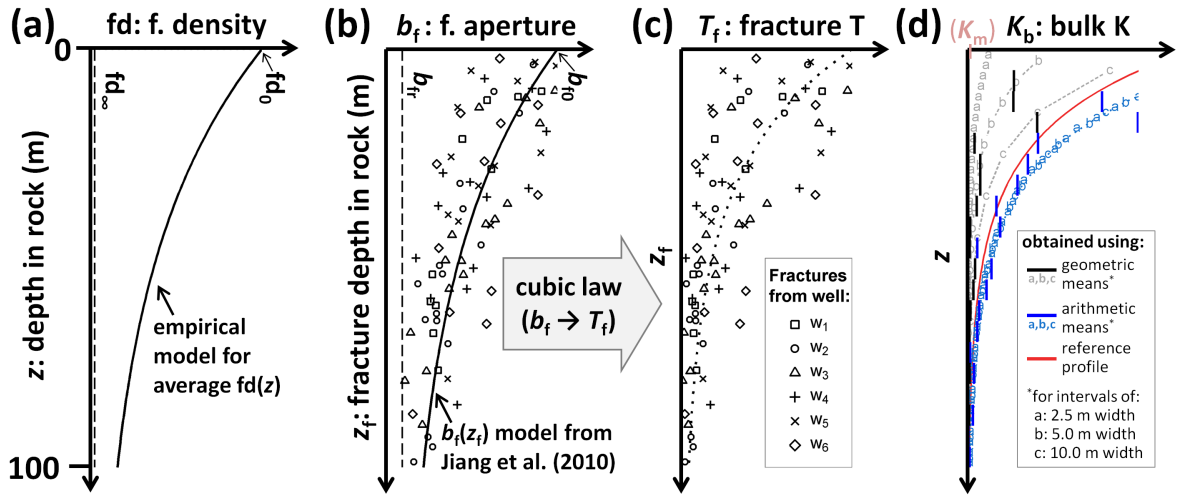


Figure 29: Models of fracture density and properties, and resulting bulk-rock hydraulics, as a function of depth in rock: (a) Fracture density (fd): reference vertical profile for average $\mathrm{fd}(z)$; (b) Fracture (hydraulic) aperture (b_f): reference vertical profile for $b_\mathrm{f}(z)$, and b_f values for each individual fracture (point symbols, explained in next graph); (c) Fracture transmissivity (T_f): T_f values for the individual fractures (point symbols) and average $T_\mathrm{f}(z)$ profile (dotted curve), both derived from the b_f data using the cubic law; (d) Fractured-rock bulk hydraulic conductivity (K_b): vertical profiles for $K_\mathrm{b}(z)$ derived through statistical analysis of the $T_\mathrm{f}, z_\mathrm{f}$ data along with the background hydraulic conductivity of the rock matrix (K_m), per regular-width depth interval. The profiles made up of short vertical bars provide interval average statistics computed from the visible $T_\mathrm{f}(z_\mathrm{f})$ data points. Differently, the broken lines with letters at the mid-intervals provide smoother vertical profiles computed using the same parameterization for the fractured rock medium but a much larger number of simulated wells and thus fractures. The letters (a, b, c) indicate the width of the depth interval used to compute the means (see the symbol legend). A reference profile for $K_\mathrm{b}(z)$, calculated directly from the reference $\mathrm{fd}(z)$ and average $T_\mathrm{f}(z)$ profiles (based on Equation 29), is also shown for comparison purposes only. In graphs b and c, the symbols used to draw the point $b_\mathrm{f}, z_\mathrm{f}$ and $T_\mathrm{f}, z_\mathrm{f}$ data distinguish the fracture data according to the notional well they belong to. The symbol association to each notional well is specified in the symbol legend of this figure's graph c, but also in Figure 28a (where a symbol is drawn inside each well bore, at ground level).

The formula that is proposed in this study for defining the reference depth trend for the density of open fractures, $\mathrm{fd}(z)$, is an exponential decay function, expressed as follows:

$$\mathrm{fd}(z) = \mathrm{fd}_\infty + (\mathrm{fd}_0 - \mathrm{fd}_\infty) \cdot e^{-\lambda_\mathrm{fd} z} \tag{25}$$

where fd_0 and fd_∞ are the reference fracture densities respectively at zero depth (z = 0 m) and infinite depth (z = ∞) in rock, and λ_fd is an exponential decay constant. Note that $\mathrm{fd}_0 \geq \mathrm{fd}_\infty$ and $\lambda_\mathrm{fd} > 0$, so that fd keeps within the range $\mathrm{fd}_\infty < \mathrm{fd} \leq \mathrm{fd}_0$ for any coherent depth $z \geq 0$ m. This formula is based on the empirical fitting equation for $\mathrm{fd}(z)$ proposed by Jiang *et al.* (2010). Equation 25 was used with arbitrary parameters to prepare the example $\mathrm{fd}(z)$ reference vertical

profile drawn in Figure 29a. But most importantly, Equation 25 provided a very good fit with the field-derived fd values for the fractured-rock aquifer system investigated in the case study (as shown later, in Figure 34 from Section 4.2), explaining why we chose this particular formula. In general, different formulas may work better than Equation 25, in some other structural settings.

(b) Hydraulic aperture of fractures

The formula that is proposed in this study to describe the systematic decrease in the average fracture hydraulic aperture (b_{f}) as a function of depth in rock (z) is based directly on the semi-empirical equation for $b_{\mathrm{f}}(z)$ developed by Jiang *et al.* (2010):

$$b_{\mathrm{f}}(z) = b_{\mathrm{f0}}\left[\frac{1}{1+(z/z_{\mathrm{c}})} + \frac{(b_{\mathrm{fr}}/b_{\mathrm{f0}})(z/z_{\mathrm{c}})}{1+(z/z_{\mathrm{c}})}\right] \tag{26}$$

where b_{f0} is the maximum effective aperture of fracture at zero normal stress (i.e. at z = 0 m), b_{fr} is the residual (asymptotic minimum) effective aperture at infinite stress (i.e. at $z \gg 0$ m), and z_{c} is a reference depth used by Jiang *et al.* (2010) to simplify the mathematical formulation. The z_{c} parameter can be viewed as the critical depth at which $b_{\mathrm{f}}(z) \approx 0.5\, b_{\mathrm{f0}}$, for as long as $b_{\mathrm{fr}} \ll b_{\mathrm{f0}}$ (the common case); it is thus the principal parameter controlling the rate of decrease of b_{f} with z: the smaller the z_{c} parameter, the faster the decrease of $b_{\mathrm{f}}(z)$. The rationale behind Equation 26 is that the effective aperture of a fracture can indeed be treated as a depth-dependent property, since it is primarily dependent on the effective normal stress across the fracture which, for ideal horizontal fractures under lithostatic conditions, varies linearly with depth in rock, assuming overlying rock material has a uniform bulk density. Many studies have indeed established that the aperture of a fracture, and therefore also the local equivalent permeability of a fracture network, generally decrease with an increase in the effective normal stress, at least until some minimum (residual) aperture is reached (Snow, 1968; Zhang & Sanderson, 1996; Zhang *et al.*, 1996; Mortimer *et al.*, 2011; Earnest & Boutt, 2014). Note that the choice of a constant value for the depth of zero normal stress (z = 0 m) within the current definition for b_{f0} implicitly assumes that the weight of the unconsolidated sediments is negligible when calculating reference $b_{\mathrm{f}}(z)$ values. Further note that this particular formula for $b_{\mathrm{f}}(z)$, and the underlying assumption of a systematic decrease in the average b_{f} with z, remain just one hypothesis amongst many.

In Figure 29b, the curve illustrates the reference vertical profile for $b_{\mathrm{f}}(z)$, prepared using Equation 26 with arbitrary parameters, while the point symbols indicate, through their coordinates b_{f} and z_{f}, the hydraulic apertures and depths in rock for all of the fractures depicted earlier in Figure 28a.

(c) Transmissivity of fractures

To assess the transmissivity of fractures, it is assumed that the hydraulic behavior of fractures conforms to the parallel plate model (Snow, 1965), i.e. that the walls of an individual fracture can be represented by two planar parallel plates separated by a constant aperture b_{f}, and that the hydraulic gradient within the plane of the fracture is uniform, so that the flow inside the fracture is laminar and strictly parallel to the fracture plane (Zimmerman & Bodvarsson, 1996). This set of assumptions allows the use of the well-known "cubic law" (Witherspoon *et al.*, 1980) for calculating the transmissivity of an individual fracture (T_{f}) as a function of its representative hydraulic aperture (b_{f}):

$$T_{\mathrm{f}}(b_{\mathrm{f}}) = \frac{\rho g}{12\mu}(b_{\mathrm{f}})^3 \tag{27}$$

where ρ is the fluid density (kg/m^3), g is the acceleration of gravity (m/s^2), and μ is the dynamic viscosity of the fluid (kg/m/s), all three being assumed constant throughout the modeled domain of interest. Under most commonly assumed standard conditions (ρ = 1000 kg/m^3, g = 9.81 m/s^2, and μ = 1.00×10^{-3} kg/m/s), the coefficient in Equation 27 has a typical value of ~8.18×10^5 m^{-1} s^{-1}.

The general validity of the cubic law to describe the flow within an open fracture has indeed been confirmed by theoretical and experimental studies (e.g. Witherspoon *et al.*, 1980; Zhang *et al.*, 2015). Moreover, although the walls of actual fractures are unavoidably rough to some degree and are not perfectly parallel, studies have further shown that the cubic law can still be used to relate the fracture flow (and hence the overall fracture transmissivity) to the geometry of the fracture, through the use of a notional "hydraulic" (or "cubic law") aperture representing the aperture required for an ideal parallel-plate fracture to produce a flow that is equivalent to the flow produced by the actual (rough) fracture, for a given hydraulic gradient (Tsang, 1992).

Equation 27 was used to derive the T_{f} property for all fractures from examples w_1 to w_6, using the b_{f} data shown in Figure 29b as input values. The derived T_{f} data are presented in Figure 29c. Furthermore, visual comparison of Figure 29c versus Figure 29b reveals that overall heterogeneity of T_{f} is greatly magnified compared to that of b_{f}, a consequence of the application of the cubic law.

Indeed, since T_f is by definition proportional to the cube of b_f, the resulting scatter of the T_f output values is far larger than that of the b_f input values, and, similarly, the slopes of the average $T_\mathrm{f}(z)$ profiles are much steeper than those of the average $b_\mathrm{f}(z)$ profiles.

(d) Hydraulic conductivity of the bulk, fractured rock

Bulk-rock hydraulic conductivity (K_b) is then estimated from the fracture transmissivity (T_f) and fracture depth (z_f) data, for each well location and all depth intervals, as follows:

$$K_\mathrm{b}^{i,j} = \frac{K_\mathrm{m}^{i}\Delta z_\mathrm{saKb} + \sum_{k=1}^{n_\mathrm{f}^{i,j}} T_\mathrm{f}^{k}}{\Delta z_\mathrm{saKb}} \tag{28}$$

where i, j, and k are respectively the well location index, the regular-width depth interval index, and the individual fracture index; K_m is the hydraulic conductivity of the rock matrix (assumed to be uniform at a given well location); Δz_saKb is the constant width parameter for discretizing the depth dimension into regular intervals for the specific purpose of computation and statistical analysis of the K_b data; and $n_\mathrm{f}^{i,j}$ is the number of fractures within the j^th interval, at the i^th well location. In addition, $n_\mathrm{di.Kb}$ is the constant number of depth intervals for statistical analysis of K_b data, and n_w is the fixed number of wells. Systematic application of Equation 28 thus results in the creation of $n_\mathrm{di.Kb}$ sets of n_w values of K_b, from which the variability of K_b is then assessed through statistical analyses.

Thus, the discontinuous $K_\mathrm{b}(z)$ profiles in Figure 29d, drawn using small vertical segments, denote the geometric (black) and arithmetic (blue) means of the K_b values derived solely from the fracture data of the examples comprising fractures (w_1 to w_6 ; n_w = 6). These means were computed per depth interval, after the z-axis had been divided into $n_\mathrm{di.Kb}$ = 20 intervals of a constant width of Δz_saKb = 5 m. Differently, the six continuous $K_\mathrm{b}(z)$ profiles in Figure 29d, that are drawn as broken lines with one repeating letter at each mid-interval, were computed from an alternative set of K_b data derived from a stochastic simulation of a much larger number of heterogeneous fracture arrangements (n_w = 10,000). As symbolically explained in the figure's legend, three continuous profiles were computed for each type of mean, using three different Δz_saKb values. Thus, the 'a', 'b', and 'c' continuous profiles are based on a depth-interval width that is respectively half, equal to, and twice the Δz_saKb = 5 m that was used for computing the discontinuous profiles. On another note, the reference profile $K_\mathrm{b.ref}(z)$ —closely inspired by the permeability–depth equation for

fractured media provided in Jiang *et al.* (2010), but with added consideration of the rock matrix—is also illustrated in Figure 29d, for comparison purposes only. $K_{\mathrm{b.ref}}(z)$ was calculated using the following one-dimensional deterministic model:

$$K_{\mathrm{b.ref}}(z) \overset{\text{def}}{=} \mathrm{fd}(z) \cdot T_{\mathrm{f}}[b_{\mathrm{f}}(z)] + K_{\mathrm{m}} \tag{29}$$

Figure 29d thus provides several choices of vertical profiles to describe the trend of $K_{\mathrm{b}}(z)$, which is actually the ultimate aim of the methodology proposed in this paper. The reason why several different $K_{\mathrm{b}}(z)$ profiles are presented in this graph, rather than a single reference $K_{\mathrm{b.ref}}(z)$ profile, is that the differences among the profiles have proven to be significant, contrary to what had been expected, which has important implications.

Firstly, none of the computed average $K_{\mathrm{b}}(z)$ profiles appears to coincide well with the reference $K_{\mathrm{b.ref}}(z)$ profile. This highlights the fact that the deterministic reference $K_{\mathrm{b.ref}}(z)$ profile is not representative of any formal measure of central tendency (e.g. arithmetic mean), due to the large heterogeneity of the fractured rock medium. Secondly, the horizontal gaps between the three geometric-mean profiles (gray curves in Figure 29d) reveal that the geometric means of K_{b} are in fact dependent on the Δz_{saKb} used, in addition to z. This can be explained through the following rationale: the wider the analysis interval, the higher the probability of encountering one or more fractures, the lower the probability of finding an interval with zero fracture (controlled solely by the rock matrix permeability), and thus the larger the computed geometric means of K_{b}. The mix of K_{b} data from unfractured rock intervals ($K_{\mathrm{b}}^{i,j} = K_{\mathrm{m}}^{i}$) with the typically much higher K_{b} data from fractured rock intervals ($K_{\mathrm{b}}^{i,j} \gg K_{\mathrm{m}}^{i}$) in fact tends to form a bimodal distribution, far different from the unimodal two-parameter lognormal distribution that is ideally typified by the geometric mean. Accordingly, the sensitivity of the geometric means of K_{b} to Δz_{saKb} is actually due to the inverse relationship between the proportion of unfractured rock intervals and the interval width (Δz_{saKb}). In this regard, note further that the median, as well as most other quantiles (especially the lower ones), were found to be also sensitive to Δz_{saKb}. Thirdly, in contrast with the geometric-mean profiles, the three arithmetic-mean profiles (blue curves in Figure 29d) highlight that the arithmetic means of K_{b} are actually much less sensitive to Δz_{saKb}. Accordingly, any arithmetic-mean profile computed from a given set of K_{b} data should effectively be converging towards the same continuous “arithmetic-mean” depth trend, whatever the Δz_{saKb} used.

The above considerations have important implications regarding the workable approaches for a proper assessment of the vertical spatial variability of K_{b}. First of all, the deterministic $K_{\mathrm{b.ref}}(z)$

profile should simply be discarded, since the $K_{\mathrm{b.ref}}$ values it proposes represent neither arithmetic nor geometric means (nor medians) of K_{b}. The geometric-mean profiles, due to their sensitivity to Δz_{saKb}, should be used with caution, and the Δz_{saKb} used for the computations should always remain clearly apparent. Conversely, it appears that the arithmetic-mean profiles can be used without any particular precaution. However, depending on the purpose for the computation of average $K_{\mathrm{b}}(z)$ profiles, it may be preferable to use measures of central tendency that are less controlled by the large K_{b} values than is the arithmetic mean —such as the geometric mean, the median, …— despite the downside of the sensitivity to Δz_{saKb}. The geometric mean is probably the most appropriate measure of central tendency in most cases, since it has been shown that the equivalent (i.e. the representative average of) permeability of a fracture network actually depends "on the geometrical mean of the local fracture permeability distribution" (de Dreuzy *et al.*, 2002). Otherwise, one of the most efficient manners to statistically describe the vertical spatial variability of K_{b} without obscuring its depth-independent component of variability probably is to present the $n_{\mathrm{di.Kb}}$ distributions of the $\log K_{\mathrm{b}}$ data from each depth interval in their entirety. These implications are taken into account in the remainder of the paper (more especially in the presentation of the main results of the case study, in Section 4.3.1).

As a whole, the rationale and illustrative data of the problem conceptualization strongly support the starting hypothesis that a stochastic approach will constitute a significant improvement over the deterministic approach from Jiang *et al.* (2010), for assessment and modeling of the overall variability of K_{b} arising from the intrinsic heterogeneity of the fractured rock medium.

3. Methodology for the Monte Carlo stochastic simulation

This section describes how the problem conceptualization (Section 2) was effectively translated into an operational methodology. A stochastic approach was found to be necessary in order to meet the objectives of the study, chiefly because fractured-rock aquifer media are intrinsically heterogeneous in general, but also because of the variability in the criteria considered by the well drillers, from a drilling operation to another, regarding when to stop the drilling of the open-hole wells (i.e. the drillers' criteria C1–C3 defined earlier, in Section 2.3). A stochastic modeling framework was thus developed (present Section 3), which was then thoroughly tested through a case study involving the matching of observations and parametric simulations (next Section 4). The stochastic modeling was implemented by the authors using the R programming language (R Core Team, 2017): the developed R codes can be found in Annexe A7.7. Note, however, that many methodological details are rather provided in the case study section, to allow an easier understanding of their implications.

3.1 The stochastic modeling workflow

The proposed stochastic modeling framework is based largely on the concepts, variables, and formulas defined in the problem conceptualization that are relevant for describing, among others, the transmissivity and depth of the open-hole wells, the drilling-depth criteria considered by the well drillers and, last but not least, the arrangement and properties of the fractures throughout the fractured-rock aquifer system within the depth range of interest. Yet, in addition to the variables already defined in the problem conceptualization, several stochastic (random) variables must now be defined as well, to make it possible to simulate the many types of heterogeneities involved in the problem under study, through a Monte Carlo simulation approach (e.g. heterogeneity of fracture apertures, variability of minimum drill hole depths in rock, etc.).

The basic implementation of the developed stochastic modeling workflow involves the steps summarized in Table 14 below. Note, however, that with only slight modifications to the basic workflow sequence, several more fundamental research questions can be addressed as well. Two examples of such investigations are provided in the case study (Sections 4.3.2 and 4.3.3). Further note that realistic (ideally field-derived) a priori values should be assigned to the model parameters when implementing the developed stochastic modeling workflow for the hydraulic characterization of an actual fractured-rock aquifer system at the regional scale; values which will later be either modified or confirmed through model calibration.

Table 14: Steps of the stochastic modeling workflow

W1.	Gathering of the required input data
W2.	Preparation of the calibration data
W3.	Initial setup of the stochastic model
W4.	Optimization loop for model calibration: .a. Execution of the stochastic model .b. Analysis of the output simulated data .c. Adjustment of the model sub-parameters .d. Loop until convergence is achieved
W5.	Practical exploitation of model results

The following subsections explain what is involved in steps W1 through W5 of the stochastic modeling workflow, listed in Table 14 above.

Step W1: Gathering of the required input data

In a first step, the input data required in the next step (W2) for preparing the calibration target data must be gathered. Essentially, these consist of well transmissivity estimates ($\log T_{\mathrm{w}}$) and well depth (d_{w}) paired data. Mixed indications about actual well transmissivity ($\log T^{*}_{\mathrm{w}(<|\approx|>)}$) are knowingly disregarded throughout the process, because no method has yet been devised to *fully* exploit the $\log T^{*}_{\mathrm{w}(<|\approx|>)}$ data for making statistical inferences about $\log T^{*}_{\mathrm{w}}$ while thoroughly considering the highly uneven reliability of the $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates, as recognized by Laurencelle & Lefebvre (2018, in prep.-a) (Chapter 6). Accordingly, the method for making statistical inferences about $\log T^{*}_{\mathrm{w}}$ is rather a provisional and approximate approach based on reliability-aware analysis of the raw $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates, hence the choice of data on $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates as one of the two types of required input data.

As stressed in the problem conceptualization (Section 2.1 mostly), not all $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates are “quantitatively reliable” (QR); many are indeed only qualitatively informative. The “quantitatively reliable range” (QRR) should ideally be assessed independently for each estimate —since there is virtually always one or more of the SC test parameters that differs from one test to another—

through implementation of the approach described in Laurencelle & Lefebvre (2018, in prep.-a) (Chapter 6). Yet, due to the practical reasons mentioned above, it is proposed, instead, to determine only the most typical QRR, i.e. the QRR for the most frequent combination of SC test parameters in the T(SC) dataset. This "global QRR" best representing the whole T(SC) dataset will be used in the next step (W2) of the workflow.

Note that the dataset can be subdivided within different zones according to known differences in hydrogeological context, or to test if such differences exist in different zones of the regional study area considered. The stochastic modeling workflow is then applied separately to each subset of the T(SC) dataset in the different zones considered, as done for the application documented in the present paper. For this purpose, the $\log T_\mathrm{w}$, d_w data should be accompanied by some location data (spatial coordinates, divisions of the study area in zones based for instance on the geology, etc.), so that the 3D spatial variability of $\log T_\mathrm{w}$ across the study area can be appreciated through exploratory statistical analyses. Thus, if several zones appear to differentiate from each other, the corresponding categorical variable (e.g., the geological province at each well location) is stored along with the $\log T_\mathrm{w}$, d_w data. This categorical variable allows the splitting of the full input dataset by zone, and hence to run independent instances of the stochastic modeling workflow for each zone. In sum, the $\log T_\mathrm{w}$, d_w, most typical QRR, and zone data together constitute the minimum requirements in terms of input data to implement the stochastic modeling workflow.

Step W2: Preparation of the calibration data

In a second step, calibration data must be prepared from the $\log T_\mathrm{w}$, d_w data. Two main types of calibration data are thus considered. Note that the calibration data will generally differ from one zone to another.

The first type of calibration data consists of well density (wd) per depth interval of regular width (= Δd_{sadw}), calculated from depth-wise statistical analysis of the d_w data —hence the subscript for the last parameter. Values of wd are expressed as relative frequencies giving the proportion (in %) of the wells ending within each depth interval. The use of percentages is most appropriate since it does not require the simulation of the same number of wells as there were in the input data set. Although the $\mathrm{wd}(d_\mathrm{w})$ profile may be used as is for model calibration, it is preferred to use a cumulative wd profile: $\mathrm{wd}_\mathrm{cum}(d_\mathrm{w})$. The $\mathrm{wd}_\mathrm{cum}(d_\mathrm{w})$ profile is prepared by simply computing the running total (cumulative sum) of the wd values per depth interval, taken from the $\mathrm{wd}(d_\mathrm{w})$ profile, in order of increasing d_w. The $\mathrm{wd}_\mathrm{cum}(d_\mathrm{w})$ profile is thus, in a way, an approximate

equivalent of the "empirical cumulative distribution function" (ECDF) for the d_{w} data. Examples of $\mathrm{wd}(d_{\mathrm{w}})$ profiles can be found in Section 4.3.1, while examples of $\mathrm{wd}_{\mathrm{cum}}(d_{\mathrm{w}})$ profiles are rather provided in Annexe A7.3.

The second type of calibration data consists of quantile statistics about actual well transmissivity ($\log T_{\mathrm{w}}^{*}$), since direct use of the T(SC) estimates data as the calibration data would be totally inappropriate. These quantile statistics about $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ are inferred from the raw $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates, using the "global QRR" (gQRR) determined earlier (at Step W1). The computation procedure, performed for each depth interval of regular width (= Δd_{saTw}), assumes that all $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates falling inside the gQRR are effectively "quantitatively reliable" (QR), that all $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates falling below the gQRR are indefinitely lower than the lower bound of the gQRR, and finally that all $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates falling above the gQRR are indefinitely higher than the upper bound of the gQRR, as was explained earlier (in Section 2.1). These assumptions, made primarily for practical reasons, make sure that the non-QR estimates never share the same range as the QR estimates, which is essential for a successful implementation of the following procedure for computing quantile statistics about $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ from $\log T_{\mathrm{w}}$ data. First, one ECDF is computed for each depth interval, from the $\log T_{\mathrm{w}}$ data. An easy method to prepare the ECDF for a given depth interval is to compute the quantiles (of all $\log T_{\mathrm{w}}$ data in that depth interval) for a finely discretized series of cumulative probability (P) values ranging from 0.00 to 1.00. Then, the obtained ECDF's are truncated at both ends in order to discard the portions that are in fact outside the gQRR, so that the remaining (~central) portions of the ECDF's comprise QR quantiles only. Thus, the truncated ECDF's, although initially computed from raw $\log T_{\mathrm{w}}$ data, can henceforth be used as if they were ECDF's for actual $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$, that is: $P(\log T_{\mathrm{w}}^{*})$. Finally, it is convenient to also prepare inverse ECDF's, called "empirical quantile functions" (EQF's), so that it is equally possible to get $\log T_{\mathrm{w}}^{*}(P)$ directly. The structure of the truncated EQF's makes it easier to prepare calibration data for $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$, since the independent variable is P. Target values for model calibration can thus be prepared from the truncated EQF's, either based on specific P values (e.g., the median at P = 0.50) or ranges of P values (e.g., 0.40 < P < 0.60 central quantiles). In summary, the second type of calibration data consists of QR quantiles of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ obtained from truncated EQF's giving reliable values of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}(P)$, on a per-depth-interval basis.

The main calibration data therefore comprise $\mathrm{wd}(d_{\mathrm{w}})$ and $\mathrm{wd}_{\mathrm{cum}}(d_{\mathrm{w}})$ vertical profiles, as well as QR quantile statistics about $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$, for each depth interval. These calibration data, as a whole, are also referred to as "observed data" or "observed statistics" throughout this paper. Moreover, it is important to mention that the same depth-interval widths (Δd_{sadw} and Δd_{saTw}) should be used later

when computing the corresponding "simulated statistics", in order to ensure consistency between observed and simulated statistics, especially throughout the model calibration process (at Step W4). Furthermore, it is worth noting that detecting a decreasing trend of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}(d_{\mathrm{w}})$ in the observed data is not paramount for a successful implementation of the workflow, although it may be more difficult to take into account the well-drillers' sampling bias in such uncommon cases where there appears to be no decrease with depth. Nevertheless, it is expected that a rapidly decreasing $\log T_{\mathrm{w}}^{*}(d_{\mathrm{w}})$ trend will be apparent in most case studies of regional fractured-rock aquifer systems, at least in the 0–100 m depth range.

Step W3: Initial setup of the stochastic model

In a third step, the nature of the stochastic model, in terms of processes to simulate, must be set up. This is done in three stages. Firstly, global parameters of the stochastic model must be fixed (see Section 3.2.1). All Boolean parameters (as defined in Table 16.C of Section 3.2.2) should be enabled, in preparation for the model calibration process to follow. Secondly, each stochastic parameter of the model must be assigned the desired mathematical definition. It is recommended to use the mathematical definitions provided in Table 16 (below) as the starting point for this purpose. Thirdly, the sub-parameters defining all stochastic parameters of the stochastic model (e.g. fd_0, K_{m}^{*}, etc.) must be initialized, by assigning a priori values to them. In most cases, the initial values will be either arbitrary best-guess values or reference (typical) values found in the literature, yet in some cases, it may be possible to define some of the initial values based on field-derived data from the region under study, which is of course the ideal way.

The special vertical-distance "Δz…" stochastic variables involved in the drilling submodel must also be set up in this third stage, ideally based on field-derived data from the region under study. These "Δz…" variables, which were defined earlier (in Section 2.1), respectively measure: the local thickness of the unconsolidated sediments overlying the rock aquifer (Δz_{sed}), the local depth of the static water level relative to the ground (Δz_{stat}), and the distance between the pump and the bottom of the well (Δz_{pump}). These data are indeed rather common in regional databases. Yet, due to their notable variability and also because of the dimensionality (1D-z rather than 3D) as well as the stochasticity of the modeling approach, the field-derived Δz values reported for the wells cannot be used directly. Instead, the available Δz data are processed and summarized empirically in the form of one ECDF (and its corresponding EQF) for each variable. These statistically-based definitions for the Δz variables thus turn them into stochastic variables. These

EQF's will then be sampled whenever a random value of Δz_{sed}, Δz_{stat}, or Δz_{pump} is required during the stochastic simulation. Note, however, that if a Δz variable cannot be assessed on a per-well basis from the available field-derived data, its "stochastic" definition can then be based on a single, arbitrary constant value, so that whenever the stochastic simulation needs a value of that Δz variable, the constant value is systematically returned.

Additional types of field-derived data may be gathered as well, when feasible, to better constrain the initial parameterization of the stochastic model. A first type of additional data, which can provide a significant support for the initial setup of the stochastic model, are structural information about the variable density (intensity, frequency) of fractures in the shallow bedrock. Such information is typically obtained from structural analysis of optical or acoustic televiewer images acquired in a sufficient number of open boreholes throughout the study area (Keys, 1990; Paillet *et al.*, 1990; Williams & Johnson, 2004). Availability of structural data thus implies that a geophysical borehole logging campaign has been conducted beforehand. Structural data can then be exploited to infer a simple best-fit formula describing the average regional trend of $\mathrm{fd}(z)$, and also, when possible, to estimate the overall variance of fd about this average trend; it is then possible to define the reference term $\mathrm{fd}^*(z)$, and possibly also the heterogeneity term H_{fd} (e.g., see what was done in the case study that follows, Section 4.2, at "Applying Step W3"). Other sorts of relevant structural data include field-derived estimates of fracture apertures (b_{f}) or fracture transmissivities (T_{f}), yet in practice, such fracture properties are so seldom assessed in real settings that the related sub-parameters of the stochastic model are rather initialized based on best estimates. Another type of useful —and more commonly available— additional data is basic information about the hydraulic conductivity of the rock matrix (K_{m}). In some regions, the K_{m} of different bedrock units may indeed already have been assessed and documented, thus providing readily exploitable statistics about K_{m}. Reported values for the mean and variance of $\log K_{\mathrm{m}}$ can then be used for the initial parameterization of the rock-matrix component of the stochastic model. Other types of pre-existing data may be exploited in a similar manner, where available.

Otherwise, remaining stochastic model sub-parameters which could not be constrained by field-derived data should simply be assigned arbitrary initial values, as instructed earlier. This is not a major problem, since the model sub-parameter values will be optimized throughout the model calibration process that follows (at Step W4).

Step W4: Optimization loop for model calibration

In a fourth step, sub-parameters of the stochastic model are progressively optimized through a manual iterative calibration process based on a trial and error approach. Each iteration of the optimization loop consists of the following four sub-steps:

a) First, the stochastic model is run, with its current sub-parameter values.
b) After the model has finished running, the simulated data are compared against the observed data (i.e. the calibration data that were prepared in Step W2 of the workflow), and the discrepancies between them —or in other words the goodness of fit— are assessed quantitatively.
c) If the discrepancies exceed some arbitrarily-defined convergence criteria, adjustments are made manually to some of the model sub-parameters, with the aim of reducing these discrepancies in the next model run.
d) The calibration process continues (loops) with additional iterations, until convergence criteria are satisfactorily met, numerically or at least visually.

Note that plausibility of the tested values for the model sub-parameters should be continuously checked throughout the calibration process to avoid ending up with a “calibrated” model comprising some unrealistic components. Moreover, it is worth stressing once again that the stochastic modeling workflow should be run separately for each of the zones previously defined at Step W1. However, it is nevertheless recommended to use the set of optimized sub-parameter values obtained from successful calibration of the stochastic model for a first zone, as the initial values to be assigned into the new instances of the stochastic model while running the workflow for the next zones. Our own experience with the stochastic model has indeed shown that optimal values may be similar between the different zones for most of the sub-parameters.

Step W5: Practical exploitation of model results

Finally, once calibration of the stochastic model is achieved for a given zone, various descriptive statistics about the simulated fractured-rock-medium, fracture, and well properties, can readily be derived from the model results. And since the model has been calibrated, it is assumed that these simulation-derived statistics are equally appropriate (i.e. representative) to describe the real fractured-rock-and-wells system within that specific zone.

First of all, statistics on $\log K_{\mathrm{b}}$ can be computed, on a per-depth-interval basis, based on the K_{b} data from the model results, notably in order to investigate the changes in the statistical distribution of $\log K_{\mathrm{b}}$ as a function of depth in rock (z), including the commonly expected depth dependence of $\log K_{\mathrm{b}}$. In a practical context, the computed depth-wise statistics on $\log K_{\mathrm{b}}$ may thus be used, for instance, to prepare an a priori K_{b} field —either smooth and deterministic, or noisy and stochastic, depending on whether the variability around the average vertical profile of $\log K_{\mathrm{b}}\,(z)$ is considered or not— for a numerical groundwater flow model.

Additional interesting information regarding the real fractured rock aquifer can also be inferred from the calibrated stochastic model results. These notably include statistics on fracture aperture (b_{f}), fracture transmissivity (T_{f}), and fracture density (fd) as a function of z, as well as zone-wide statistics on the hydraulic conductivity of the rock matrix (K_{m}). Statistics for the fracture-related variables are derived from depth-wise analysis of the simulated fracture data —using the z_{f} data to locate the fractures along the discretized z-axis— while statistics for K_{m} are simply derived from the K_{m} data simulated on a per-well basis. Alternatively, some of these statistics may be deduced analytically through exploitation of the formulas for the stochastic parameters in the calibrated model.

Furthermore, the $\log T_{\mathrm{w}}^{*}, d_{\mathrm{w}}$ data describing the simulated wells may also be analyzed, following computation methods similar to those proposed in Step W2 for preparing the calibration data. Yet, in fact, obtaining detailed statistics about simulated wells is of little practical use, beyond model calibration. Nevertheless, simulated well data from a calibrated model remain interesting in that they can be exploited to better understand the implications of well-drillers' sampling bias.

3.2 The stochastic model

The stochastic modeling approach itself consists in simulating the drilling of a large number of virtual wells, one at a time. The overall process of the stochastic model is summarized as a flow chart in Table 15, and described in more detail, step by step, below.

The stochastic model considers three nested levels for simulating random quantities, and thus for adding heterogeneity: per well, per depth interval, and per fracture. Accordingly, three index variables, i, j and k, are respectively defined as the well location index (i), the regular-width depth interval index (j), and the individual fracture index (k). All of these index variables start at 1, but they end at different integer values: i ends at n_{w}, the fixed number of wells to simulate; j ends at $n_{\mathrm{di.fg}}$, the fixed number of depth intervals for random fracture generation; whereas k ends at $n_{\mathrm{f}}^{i,j}$,

the number of fractures within the j^{th} depth interval, at the i^{th} well location. This nested structure is consistent with the one used earlier in the problem conceptualization (Section 2.4.d: the part about K_{b}).

Table 15: Stochastic model flow chart

M1.	Model initialization
M2.	Preparation of per-well stochastic values
M3.	Virtual-well drilling simulation loop
	.a. Random generation of fractures along the entire 1D-z simulation domain
	.b. Assignment of heterogeneous hydraulic apertures to the fractures
	.c. Calculation of the resulting fracture transmissivities
	.d. Computation of the cumulative drill hole bulk transmissivity, $T^*_{\mathrm{dh}}(d)$, and of the minimum target for well transmissivity, $T^*_{\mathrm{w.target}}(d)$, as a function of depth in rock (d), for the full depth range of the simulation domain
	.e. Determination of drilling depth (d_{d}) → well depth in rock (d_{w})
	.f. Storage of the simulated fracture and well data
M4.	Preparation of the model results from the simulated data

Step M1: Model initialization

Initialization of the stochastic model first requires carrying out the operations previously described in Step W3 of the workflow (Section 3.1), including setup of the global parameters and of the stochastic parameters of the model. The global parameters and the stochastic parameters of the stochastic model are described in detail below, respectively in Sections 3.2.1 and 3.2.2. The default (i.e. initial or a priori) values for the model sub-parameters may then, when relevant, be replaced by different selected values, or by previously saved optimal values from a successful calibration process, if available. Once the model parameters are set up, the calibration data for the zone under study are loaded, and the 1D-z simulation domain is discretized into intervals in preparation for random fracture generation, based on the global parameter Δz_{fgen}, thereby setting up the $n_{\mathrm{di.fg}}$ parameter as well. Finally, several arrays are allocated in computer memory to store the well and fracture data to be simulated.

Step M2: Preparation of per-well stochastic values

Before entering the virtual-well drilling simulation loop, all stochastic components of the model that are defined on a per-well basis only are computed. Based on the definitions given in Table 16 for the stochastic parameters of the model, all of the heterogeneity terms ($H_{...}$) except $H_{\mathrm{bf.f}}$ (i.e. the term for fracture aperture heterogeneity at the fracture level) can indeed be computed prior to the loop. Several stochastic parameters of the model can therefore also be fully computed prior to the loop: K_{m}, $d_{\mathrm{w.min}}$ and $d_{\mathrm{w.max}}$, as well as $\Delta z_{\mathrm{dh.min}}$, Δz_{pump}, Δz_{sed}, and Δz_{stat}. Note, however, that the latter three parameters are rather computed by random sampling from the empirical distributions prepared in Step W3 of the workflow (Section 3.1).

Step M3: Virtual-well drilling simulation loop

The virtual-well drilling simulation loop is then entered. Well index i starts at 1, and increases up to n_{w}, the total number of virtual wells to simulate. Since the computer-oriented algorithm described here is essentially the technical implementation of the concepts presented in Section 2.3, it is recommended to consider Figure 28 while reading the details of the virtual-well drilling simulation loop. Figure 28, as a matter of fact, illustrates particularly well the principles behind the following algorithm. An iteration of the simulation loop (i.e. for the i^{th} well) can thus be summarized as follows, in the biased drilling mode:

a. A random arrangement of horizontal fractures is generated along the z-axis, inside the fracture simulation domain extending from 0 m to Z_{max} (as defined below in Section 3.2.1). This is done by looping through the $n_{\mathrm{di.fg}}$ depth intervals from the current well location. The operations inside this inner loop in j consist of first computing the stochastic number of fractures for the current interval, $n_{\mathrm{f}}^{i,j}$, and then positioning each k^{th} fracture randomly inside the interval, at a fracture depth ($z_{\mathrm{f}}^{i,j,k}$) coordinate obtained by sampling from $z_{\mathrm{f}} \sim \mathrm{Uniform}\left(z_{\mathrm{a}}^{j}, z_{\mathrm{b}}^{j}\right)$, where z_{a}^{j} and z_{b}^{j} are the bounds of the current depth interval.
b. Each k^{th} fracture within each j^{th} depth interval is assigned a stochastic value of aperture $b_{\mathrm{f}}^{i,j,k}$ through repeated computation, which is partly controlled by fracture location ($z_{\mathrm{f}}^{i,j,k}$).
c. Transmissivity of each generated fracture ($T_{\mathrm{f}}^{i,j,k}$) is calculated directly from its aperture ($b_{\mathrm{f}}^{i,j,k}$), through the cubic law (Equation 27).

d. The cumulative drill hole bulk transmissivity as a function of increasing depth in rock, $T_{\mathrm{dh}}^{*i}(d)$, as well as the depth-dependent minimum target for well transmissivity, $T_{\mathrm{w.target}}^{*\mathrm{i}\ldots}(d)$, are then computed along the d-axis, either continuously from 0 m to $Z_{\max}$, or at fracture locations only (the latter option was used in the case study which follows).

e. The drilling depth (d_{d}) is then determined by a computer-simulated "virtual driller", through analysis of the depth-dependent data prepared at previous step (d). The virtual driller essentially checks if there is a threshold depth (d_{t}) beyond which $T_{\mathrm{dh}}^{*i}(d) > T_{\mathrm{w.target}}^{*\mathrm{i}\ldots}(d)$; if so, the drilling depth in preparation for the i^{th} virtual well (d_{d}^{i}) is set to $d_{\mathrm{d}}^{i} = d_{\mathrm{t}}$ if $d_{\mathrm{w.min}}^{i} < d_{\mathrm{t}} < d_{\mathrm{w.max}}^{i}$, to $d_{\mathrm{d}}^{i} = d_{\mathrm{w.min}}^{i}$ if $d_{\mathrm{t}} < d_{\mathrm{w.min}}^{i}$, or else to $d_{\mathrm{d}}^{i} = d_{\mathrm{w.max}}^{i}$ if $d_{\mathrm{t}} > d_{\mathrm{w.max}}^{i}$; otherwise, it is set anyway to $d_{\mathrm{d}}^{i} = d_{\mathrm{w.max}}^{i}$. The drilling depth d_{d}^{i} thus defines the effective end depth in rock for the i^{th} virtual well ($d_{\mathrm{w}}^{i} = d_{\mathrm{d}}^{i}$), and hence also determines its total bulk transmissivity, through $T_{\mathrm{w}}^{*i} = T_{\mathrm{dh}}^{*i}(d_{\mathrm{d}}^{i})$. Note that in the alternative unbiased drilling mode, the drilling depth is systematically set to $d_{\mathrm{d}}^{i} = d_{\mathrm{w.max}}^{i}$, and d_{w}^{i} and T_{w}^{*i} are determined following the same logic as described above (for the biased drilling mode).

f. The simulated data describing the generated fractures ($z_{\mathrm{f}}^{i,j,k}$, $b_{\mathrm{f}}^{i,j,k}$, $T_{\mathrm{f}}^{i,j,k}$) and the drilled virtual well (d_{w}^{i}, T_{w}^{*i}) are then stored in the appropriate arrays in the computer memory. Note that the current well index value (= i) is stored along with the fracture-related data, so that it is still possible to re-establish the link between the generated-fracture data and the virtual-well data at any later time, especially after the virtual-well drilling simulation loop is finished. Then, the flow continues with the next iteration of the loop.

Step M4: Preparation of model results from the simulated data

Finally, all of the stored simulated data for the n_{w} virtual wells (and 1D-z fractured-rock aquifer columns) are analyzed, in order to translate the raw model outputs into more readily interpretable and exploitable "model results". The output variable of primary practical interest is, of course, the fractured-rock bulk hydraulic conductivity (K_{b}). $K_{\mathrm{b}}^{i,j}$ is computed per well location and per depth interval from the simulated fracture transmissivity ($T_{\mathrm{f}}^{i,j,k}$) and depth ($z_{\mathrm{f}}^{i,j,k}$) data using Equation 28, as explained earlier (in Section 2.4.d, the part about K_{b}). The simulated well data (T_{w}^{*i} and d_{w}^{*i}) also constitute major outcomes of the stochastic model, but do not need any particular processing, since they are directly exploitable as model results.

3.2.1 Main global parameters

The main global parameters of the stochastic model are the following. They are presented prior to defining the stochastic variables, since they exert an important control on the simulation, and hence on model results.

A first global parameter, $Z_{\max}$, sets the maximum depth (1D-z extent) of the simulation domain — the minimum depth is always, by definition, equal to 0 m. The $Z_{\max}$ parameter controls the depth range within which synthetic fractures are randomly generated. In this study, the default value for $Z_{\max}$ is 100 m, which implies a fracture simulation domain extending from 0 to 100 m. Note, however, that a virtual well can be drilled beyond $Z_{\max}$ —only in biased drilling mode— in the particular case where the drill hole keeps a low apparent productivity and the maximum acceptable depth to drill ($d_{\mathrm{w.max}}$) is deeper than the simulation domain (i.e. $d_{\mathrm{w.max}} > Z_{\max}$).

A second global parameter, Δz_{fgen}, sets the width of the depth interval used for discretizing the 1D-z simulation domain into small regular intervals for the specific purpose of random fracture generation. In this study, the chosen value for Δz_{fgen} is 1 m, and was kept unchanged. Thus, the simulation domain is divided into $n_{\mathrm{di.fg}}$ = 100 regular intervals along the z-axis.

A third global parameter, n_{w}, sets the number of virtual wells (and arrangements of fractures) to simulate. In this study, for instance, the chosen value for n_{w} is 10,000 and is kept unchanged from one model run to another: this sample size seemed adequate, since it results in a 100-fold reduction in the standard errors of obtained estimates. It entails the simulation of 10,000 fractured-rock aquifer columns (1D-z) per model run. A high value of n_{w} is indeed needed, since it leads to generation of a large amount of fracture data which, once they are thoroughly analyzed, provide smoother (less noisy) statistics about rock bulk hydraulic conductivity (K_{b}).

A fourth global parameter, DM, sets the drilling mode. It is a Boolean parameter having two possible values: “biased” or “unbiased”. Either of these two different drilling modes, which have already been described as actual phenomena within the problem conceptualization (Section 2), is integrated into the stochastic model as a “drilling submodel”. The “biased” drilling submodel simulates biased sampling of the simulated fractured-rock aquifer columns through simulation of the drillers’ multi-criteria decision making process regarding the end depth in rock ($d_{\mathrm{dh}} \Rightarrow d_{\mathrm{w}}$) to drill the virtual wells, whereas the simpler “unbiased” drilling submodel simulates completely unbiased sampling of the simulated fractured-rock aquifer columns at predefined drilling depths in rock ($d_{\mathrm{dh}} \Rightarrow d_{\mathrm{w}}$) based on a uniform distribution favoring equally-probable sampling of every depth

interval within the simulation domain. From a research point of view, this DM parameter is of the utmost importance, since it is the most straightforward means to study the impact of the drilling mode, through comparison of model results under “biased” versus “unbiased” drilling mode. The role of the DM parameter is similarly described in Table 16.C below (Section 3.2.2).

In addition to the four key global parameters described above, other global-level parameters, especially of Boolean type (on/off), are included in the stochastic model: a total of nine Boolean parameters are indeed defined in Table 16.C below (Section 3.2.2). These on/off switches temporarily deactivate specific components of the model in order to neutralize either the random heterogeneity or the depth dependence of some of the simulated quantities (e.g. fracture apertures). By default, all of these switches are on. Again, from a research point of view, testing various combinations of on/off states for some of the global-level Boolean parameters (including the DM parameter) through a parametric study approach (as in Section 4) constitutes a very effective means for assessing the key role of the targeted components.

3.2.2 Stochastic parameters

The stochastic parameters are now defined (see summary in Table 16). Each of these parameters consists of a deterministic “reference term”, multiplied by one or two “heterogeneity terms” indeed carrying heterogeneity. The reference term is either a unique constant value, or a depth-dependent formula. The heterogeneity terms are in fact random variables based on parameterized probability distribution functions (PDF’s). The notation used to identify the reference terms is in accordance with the notation introduced in the problem conceptualization (yet a superscript asterisk is used to denote them as “reference” terms), whereas the notation used for all of the heterogeneity terms involves a common ‘H’ symbol as the base, with distinctive subscripts (e.g. H_{Km} is the heterogeneity term for stochastic parameter K_{m}).

The full computational formula in Table 16 for the stochastic number of fractures (n_{f}) is special in that it is the only one to directly involve a PDF in its equation. The formula for n_{f} indeed uses a Poisson distribution, with its parameter λ (= mean) set equal to the reference average number of fractures ($n_{\mathrm{f.aver}}$) in the depth interval. This type of PDF is particularly suited to the simulation of fracture counts, as it generates random natural numbers (starting at 0).

A lognormal PDF of the form $\mathrm{LogNorm}(\mu = 0, \sigma)$ is chosen to define most of the heterogeneity terms: $H_{\mathrm{bf.w}}$, H_{Km}, $H_{\Delta\mathrm{zdhmin}}$, and H_{Twtarget} (see Table 16). The frequent choice of the two-parameter lognormal PDF is justified primarily by the facts that such a PDF distributes ratios lower

than 1.0 and ratios higher than 1.0 evenly, i.e. that for instance, the probability of drawing the value 1/50 is the same as that of drawing the value 50/1, and that the produced heterogeneity coefficients (H) are systematically positive real numbers ($H > 0.0$). The variance of the log-transformed ratios (i.e. of $\ln H$) is controlled simply by the sub-parameter σ. The authors' experience has shown that $0.25 < \sigma < 1.00$ is a reasonable range for σ. In the case of lognormal-based heterogeneity terms, the neutral $H = 1.0$ value corresponds to the geometric mean and equally to the median of the random variable, while the arithmetic mean is higher than 1.0 (since $\mathrm{E}[H] = e^{\mu+\frac{1}{2}\sigma^2}$). The offset of the arithmetic mean from 1.0 is nonetheless fairly small: for instance, with $\sigma = 0.4$, $\mathrm{E}[H] = 1.08$, and with $\sigma = 0.8$, $\mathrm{E}[H] = 1.38$.

A gamma PDF of the form $\mathrm{Gamma}(k, \theta)$ is chosen to define the heterogeneity term $H_{\Delta\mathrm{ddwmax}}$ (see Table 16). The reason for this particular choice is that we wanted the $H_{\Delta\mathrm{ddwmax}}$ coefficients to follow a positively skewed PDF where smaller values are significantly more frequent than larger values, while having a "neutral" arithmetic mean: $\mathrm{E}[H_{\Delta\mathrm{ddwmax}}] = 1.0$. The considered ranges for the parameters of the gamma PDF were thus defined with this dual aim in mind. Note that the expected value or arithmetic mean of $H_{\Delta\mathrm{ddwmax}} = \mathrm{Gamma}(k, \theta)$ is simply $\mathrm{E}[H_{\Delta\mathrm{ddwmax}}] = \mathrm{k} * \theta$. Note also that the geometric mean as well as the median of $H_{\Delta\mathrm{ddwmax}}$ are typically both below the arithmetic mean, for instance using $k = 2.0$ and $\theta = 0.5$, thereby confirming the positive skew of the gamma PDF thus defined.

Otherwise, less common, more specialized PDF's are proposed to define the two remaining heterogeneity terms: H_{fd} and $H_{\mathrm{bf.f}}$. The first, H_{fd}, bringing heterogeneity to simulated fd values between the wells, is thus defined using a "four-parameter" Beta PDF of the form $\mathrm{Beta}_{4\mathrm{p}}(\alpha, \beta, L, U)$, which is in fact a special parameterization making it possible to set the support domain of the PDF to the arbitrary interval $[L, U]$. The four-parameter Beta PDF is indeed an advantageous choice as it guarantees that H always falls inside the support domain, hence: $H_{\mathrm{fd}} \in [L, U]$. A simple way to set up such PDF is to make sure that its support domain is valid, centered around 1.0, and symmetric ($0.0 < L < 1.0 < U$; $1.0 - L = U - 1.0 \Longrightarrow U = 2.0 - L$), while assigning the same value for the two shape parameters ($\alpha = \beta \geq 1.0$). Alternatively, an asymmetric PDF can also be set up, in which case it becomes important to verify both that the support domain is valid ($0.0 < L < 1.0 < U$) and that the expected value or arithmetic mean of H_{fd} is "neutral" i.e. that $\mathrm{E}[H_{\mathrm{fd}}] = 1.0$. Note that H_{fd} varies only from one well to another, and thus applies a uniform deviation of $n_{\mathrm{f.aver}}$ from the reference n_{f}^{*} model for all depth intervals within a given well.

The second heterogeneity term, $H_{\mathrm{bf.f}}$, bringing heterogeneity to simulated b_{f} values at the fracture level, is defined using a little known and rarely used variant of the Pareto distribution, that we named the Upper Truncated Shifted Pareto ("UTSPareto") distribution, following the work of Houghton (1988). The Pareto distribution was chosen as the basis for this heterogeneity term since it is a scale-invariant heavy-tailed PDF following a power law, which is recommended by many authors for describing the variability of b_{f} in natural fracture systems notably because of the commonly observed fractal behavior of such systems (Bonnet *et al.*, 2001; Berkowitz, 2002; de Dreuzy *et al.*, 2002; Ortega *et al.*, 2006; Davy *et al.*, 2010; Larsen *et al.*, 2010; Guerriero *et al.*, 2013; Hooker *et al.*, 2014). The need for an upper truncation of the Pareto distribution is justified by the very practical fact that such a formulation advantageously imposes a finite upper bound to the support domain for the random variable, whereas the original (untruncated) Pareto distribution does not and would occasionally generate excessively high random values diverging to $+\infty$. The special shift of the Pareto distribution is equally necessary in order to allow the use of relatively high scaling factor values ($x_{\min} \overset{\text{def}}{=} L + x_0$) while nonetheless allowing generation of very small random values of $H_{\mathrm{bf.f}}$, to simulate frequent virtually closed fractures. Thus, based on the current formulation for the $H_{\mathrm{bf.f}}$ term (in Table 16), the following conditions are provided as guidelines for a proper setup of $H_{\mathrm{bf.f}}$: $\alpha > 0.0$; $0.0 < L \ll 1.0 \ll U$; $\mathrm{E}[H_{\mathrm{bf.f}}] \approx 1.0$. Note that in order to respect the last condition of a "neutral" arithmetic mean for $H_{\mathrm{bf.f}}$, the best value to assign to the shift parameter x_0 should ideally be solved through optimization. More details about the PDF, especially including the mathematical formulas defining the UTSPareto distribution, are provided in Annexe A7.1.

Table 16 below summarizes the mathematical definition for the stochastic parameters. Note that, due to the large number of PDF's and sub-parameters involved, there is no easy way to find or estimate a priori the optimal and most realistic distribution types and sub-parameter values for all of the stochastic parameters, for a given case study. These are rather tested, or deduced, by trial and error, through the manual iterative calibration process outlined earlier (Section 3.1, Step W4).

Table 16: Stochastic model parameters for the Monte Carlo simulation (Part 1 of 3)

Stochastic parameter (symbol and description)	**Reference term(s)** (marked with an asterisk)	**Heterogeneity term(s)** (i.e. the random variables)	**Full computation formula** (including some intermediary formulas)
A. Stochastic parameters for the fractured-rock generation submodel: (i.e. for simulating random arrangements of heterogeneous fractures and rock matrix, at each individual well location)			
fd: fracture density (per unit depth) ⇕ n_f: number of fractures (or f. count)	$\mathrm{fd}^*(z) = f(z)$ ⇕ $n_\mathrm{f}^*(z_\mathrm{a}, z_\mathrm{b}) = \int_{z_\mathrm{a}}^{z_\mathrm{b}} \mathrm{fd}^*(z)dz$ where z_a, z_b are the bounds of the depth interval for which n_f^* is calculated. Equation 25 is recommended for use as the function defining $\mathrm{fd}^*(z)$.	at the well level: $H_\mathrm{fd} \sim \mathrm{Beta}_\mathrm{4p}(\alpha, \beta, L, U)$ where α and β are shape parameters, while L and U are lower and upper bounds of the limited output range for H_fd. Thus, $0 < L \leq H_\mathrm{fd}^i \leq U$, and moreover, $\langle H_\mathrm{fd} \rangle \approx 1.0$, ideally.	First, the "average" fracture count for the j^th depth interval at the i^th well location: $n_\mathrm{f.aver}^{i,j} = n_\mathrm{f}^*(z_\mathrm{a}^j, z_\mathrm{b}^j) \cdot H_\mathrm{fd}^i$ Then, the effective random value: $n_\mathrm{f}^{i,j} = \mathrm{Poisson}(\lambda = n_\mathrm{f.aver}^{i,j})$ Note: implicit n_f heterogeneity at the depth-interval level as a result of Poisson-distribution sampling.
b_f: fracture hydraulic aperture (m)	$b_\mathrm{f}^*(z_\mathrm{f}) = f(z = z_\mathrm{f})$ where z_f is fracture depth in rock. Equation 26 (from Jiang *et al.*, 2010) is recommended for use as the function defining $b_\mathrm{f}^*(z_\mathrm{f})$.	at the fracture level: $H_\mathrm{bf.f} \sim \mathrm{UTSPareto}(\alpha, L, U, x_0)$ where x_0 is a shift parameter. at the well level: $H_\mathrm{bf.w} \sim \mathrm{LogNorm}(\mu = 0, \sigma)$	The effective random value for the k^th fracture…: $b_\mathrm{f}^{i,j,k} = b_\mathrm{f}^*(z_\mathrm{f}^{i,j,k}) \cdot H_\mathrm{bf.w}^i \cdot H_\mathrm{bf.f}^{i,j,k}$ Note: $0 < L \leq H_\mathrm{bf.f}^{i,j,k} \leq U$ by definition, and moreover, expectation $\langle H_\mathrm{bf.f} \rangle \approx 1.0$, ideally.
T_f: fracture transmissivity (m^2/s)	–N/A– T_f is calculated directly from b_f using the cubic law (Equation 27).	–none directly– Heterogeneity at the fracture level comes from $H_\mathrm{bf.w} \cdot H_\mathrm{bf.f}$, but is *cubed* through the cubic law.	The derived random value for the k^th fracture…: $T_\mathrm{f}^{i,j,k} = \frac{\rho g}{12\mu}\left(b_\mathrm{f}^{i,j,k}\right)^3$
K_m: hydraulic conductivity of the rock matrix (m/s)	$K_\mathrm{m}^* = 0 < \mathrm{constant} \ll 1$ m/s Suggested a priori value: 10^{-9} m/s.	at the well level: $H_\mathrm{Km} \sim \mathrm{LogNorm}(\mu = 0, \sigma)$	The effective random value at the i^th well location: $K_\mathrm{m}^i = K_\mathrm{m}^* \cdot H_\mathrm{Km}^i$ Note: K_m is thus assumed to be uniform for a given well location but variable from a well location to another.

Table 16 …Continued… (Part 2 of 3)

Stochastic parameter (symbol and description)	**Reference term(s)** (marked with an asterisk)	**Heterogeneity term(s)** (i.e. the random variables)	**Full computation formula** (including some intermediary formulas)
B. Stochastic parameters for the "biased" drilling submodel: (i.e. for controlling the well drilling process)			
$\Delta z_{\mathrm{dh.min}}$: minimum total drill hole depth relative to ground level (m) ⇕ $d_{\mathrm{w.min}}$: minimum depth in rock of the bottom of the completed well (m)	$\Delta z^{*}_{\mathrm{dh.min}} = \text{constant} > 0$ m and $c^{*}_{\Delta \mathrm{zp}} = \text{constant} \geq 1$ where $c^{*}_{\Delta \mathrm{zp}}$ is a globally constant coefficient applied to Δz_{pump} for defining the minimum "authorized" d_{w} value for the well being drilled.	at the well level: $H_{\Delta \mathrm{zdhmin}} \sim \mathrm{LogNorm}(\mu = 0, \sigma)$	First, the raw (unconstrained) random value of $\Delta z_{\mathrm{dh.min}}$ at the i^{th} well location: $\Delta z^{i}_{\mathrm{dh.min}} = \Delta z^{*}_{\mathrm{dh.min}} \cdot H^{i}_{\Delta \mathrm{zdhmin}}$ Then, the derived random value for the i^{th} well (partly based on Equation 23b): $d^{i}_{\mathrm{w.min}} = \max \begin{pmatrix} \Delta z^{i}_{\mathrm{dh.min}} - \Delta z^{i}_{\mathrm{sed}}, \\ c^{*}_{\Delta \mathrm{zp}} \cdot \Delta z^{\mathrm{i}}_{\mathrm{pump}} \end{pmatrix}$
$d_{\mathrm{w.max}}$: maximum depth in rock of the bottom of the completed well (m)	$\Delta d^{*}_{\mathrm{dwmax}}(d_{\mathrm{w.min}}) = f(d) > 0$ m The empirical formula described by Eq. 1 from Annexe A7.2 is proposed as a starting definition for $\Delta d^{*}_{\mathrm{dwmax}}(d_{\mathrm{w.min}})$.	at the well level: $H_{\Delta \mathrm{ddwmax}} \sim \mathrm{Gamma}(k, \theta)$	The effective random value for the i^{th} well: $d^{i}_{\mathrm{w.max}} = d^{i}_{\mathrm{w.min}} + \Delta d^{*}_{\mathrm{dwmax}}(d^{i}_{\mathrm{w.min}}, H^{i}_{\Delta ddwmax})$
$T^{*}_{\mathrm{w.target}}$: minimum target for well transmissivity (m^2/s) Note: This parameter is more complex in that it evolves throughout the drilling operation. Accordingly, three dots ('…') are appended to the superscript of some terms in the computation formulas (forth column), in order to recall their evolving nature.	$T^{**}_{\mathrm{w.target}}(s_{\mathrm{w.a}}) = f(s_{\mathrm{w.a}})$ where $s_{\mathrm{w.a}}$ is projected available drawdown in the completed well. The algorithm that is described in Annexe A7.2 —which is based on optimization of the peak drawdown induced in a private water well by daily water pumping— is the recommended approach for defining the $T^{**}_{\mathrm{w.target}}(s_{\mathrm{w.a}})$ relationship.	at the well level: $H_{\mathrm{Twtarget}} \sim \mathrm{LogNorm}(\mu = 0, \sigma)$	First, the projected available drawdown ($s^{i\ldots}_{\mathrm{w.a}}$), evolving along with the drill hole depth in rock ($d^{\mathrm{i}\ldots}_{\mathrm{dh}}$) throughout the drilling at the i^{th} well location (based on Equation 23a): $s^{i\ldots}_{\mathrm{w.a}} = d^{\mathrm{i}\ldots}_{\mathrm{dh}} - \Delta z^{i}_{\mathrm{pump}} + \Delta z^{i}_{\mathrm{sed}} - \Delta z^{i}_{\mathrm{stat}}$ Then, the evolving effective random value, throughout drilling of the i^{th} well: $T^{*\mathrm{i}\ldots}_{\mathrm{w.target}} = T^{**}_{\mathrm{w.target}}(s^{i\ldots}_{\mathrm{w.a}}) \cdot H^{i}_{\mathrm{Twtarget}}$

Table 16 …Continued… (Part 3 of 3)

C. Boolean parameters of the stochastic model: (i.e. the on/off switches for optional neutralization or simplification of some of the model components)	
DM: drilling mode ('on' = "biased")	When DM is switched off (i.e. to "unbiased" mode), the three main parameters of the drilling submodel are simplified as follows: $d^{i}_{\mathrm{w.min}} = 0$ m (globally constant), so that it is ineffective; $d^{i}_{\mathrm{w.max}} = \mathrm{Unif}(a = 0\ \mathrm{m}, b = Z_{max})$; whereas $T^{\mathrm{i...}}_{\mathrm{w.target}}$ is not calculated, since it is ineffective (i.e. not used at all) in this drilling mode. As a result, virtual wells are drilled to purely-random depths in rock, i.e. to depths in rock uniformly distributed within the 1D-z simulation domain.
$\mathrm{fd.zdep}$: depth-dependent fracture density ('off' = depth independent)	When $\mathrm{fd.zdep}$ is switched off, $\mathrm{fd}^{*}(z)$ is replaced by the globally constant fd^{*}_{0} term, so that $n^{*}_{\mathrm{f}}(z_{\mathrm{a}}, z_{\mathrm{b}}) = \mathrm{fd}^{*}_{0} \cdot (z_{\mathrm{b}} - z_{\mathrm{a}})$, and therefore, $n^{i,j}_{\mathrm{f.aver}} = \left(\mathrm{fd}^{*}_{0} \cdot \Delta z_{\mathrm{fgen}}\right) \cdot H^{i}_{\mathrm{fd}}$.
$\mathrm{fd.iw.hetero}$: inter-well heterogeneity for fracture density ('on' = yes)	When $\mathrm{fd.iw.hetero}$ is switched off, the default formula for H_{fd} is replaced by $H_{\mathrm{fd}} = 1.0$, so that the heterogeneity term at the well level is systematically neutralized. However, note that this simplification does not cancel the heterogeneity arising from the Poisson-distribution sampling.
$b_{\mathrm{f}}\mathrm{.zdep}$: depth-dependent fracture apertures ('off' = depth independent)	When $b_{\mathrm{f}}\mathrm{.zdep}$ is switched off, $b^{*}_{\mathrm{f}}(z_{\mathrm{f}})$ is replaced the globally constant b^{*}_{f0} term. Accordingly, $b^{i,j,k}_{\mathrm{f}} = b^{*}_{\mathrm{f0}} \cdot H^{i}_{\mathrm{bf.w}} \cdot H^{i,j,k}_{\mathrm{bf.f}}$.
$b_{\mathrm{f}}\mathrm{.hetero}$: heterogeneous fracture apertures ('off' = deterministic values)	When $b_{\mathrm{f}}\mathrm{.hetero}$ is switched off, default formulas for $H_{\mathrm{bf.f}}$ and $H_{\mathrm{bf.w}}$ are both replaced, by $H_{\mathrm{bf.f}} = 1.0$ and $H_{\mathrm{bf.w}} = 1.0$, so that terms for heterogeneity at both the well level and the fracture level are systematically neutralized. Accordingly, the full computation formula for b_{f} becomes: $b^{i,j,k}_{\mathrm{f}} = b^{*}_{\mathrm{f}}\left(z^{i,j,k}_{\mathrm{f}}\right)$ —or even simpler if $b_{\mathrm{f}}\mathrm{.zdep}$ is 'off' as well: $b^{i,j,k}_{\mathrm{f}} = b^{*}_{\mathrm{f0}}$.
$b_{\mathrm{f}}\mathrm{.iw.hetero}$: inter-well heterogeneity for fracture apertures ('on' = yes)	When $b_{\mathrm{f}}\mathrm{.iw.hetero}$ is switched off, the default formula for $H_{\mathrm{bf.w}}$ is replaced by $H_{\mathrm{bf.w}} = 1.0$, so that the heterogeneity term at the well level is systematically neutralized. Note that this Boolean parameter does not affect the $H_{\mathrm{bf.f}}$ term.
$K_{\mathrm{m}}\mathrm{.hetero}$: heterogeneous hydraulic conductivity of the rock matrix ('off' = deterministic values)	When $K_{\mathrm{m}}\mathrm{.hetero}$ is switched off, the default formula for H_{Km} is replaced by $H_{\mathrm{Km}} = 1.0$, so that the heterogeneity term at the well level is systematically neutralized. Accordingly, $K^{i}_{\mathrm{m}} = K^{*}_{\mathrm{m}}$, that is, a uniform K_{m} for all simulated fractured-rock aquifer columns (i.e. at all well locations).
$T_{\mathrm{wtarget}}\mathrm{.zdep}$: depth-dependent min. targets for well transmissivity ('off' = deterministic values)	When $T_{\mathrm{wtarget}}\mathrm{.zdep}$ is switched off, $T^{**}_{\mathrm{w.target}}(s_{\mathrm{w.a}})$ is replaced by a globally constant $T^{**}_{\mathrm{w.target0}}$ term —which value may be set for instance through use of the usual $f(s_{\mathrm{w.a}})$ formula with some arbitrary value of $s_{\mathrm{w.a}}$ deemed representative. Accordingly, $T^{*\mathrm{i...}}_{\mathrm{w.target}} = T^{**}_{\mathrm{w.target0}} \cdot H^{i}_{\mathrm{Twtarget}}$.
$T_{\mathrm{wtarget}}\mathrm{.hetero}$: heterogeneous min. targets for well transmissivity ('off' = deterministic values)	When $T_{\mathrm{wtarget}}\mathrm{.hetero}$ is switched off, the default formula for H_{Twtarget} is replaced by $H_{\mathrm{Twtarget}} = 1.0$, so that the term for heterogeneity at the well level is systematically neutralized. Accordingly, the full computation formula for $T_{\mathrm{w.target}}$ simply becomes: $T^{*\mathrm{i...}}_{\mathrm{w.target}} = T^{**}_{\mathrm{w.target}}\left(s^{i...}_{\mathrm{w.a}}\right)$ —or even simpler if $T_{\mathrm{wtarget}}\mathrm{.zdep}$ is 'off' as well: $T^{*\mathrm{i...}}_{\mathrm{w.target}} = T^{**}_{\mathrm{w.target0}}$.

4. Case study

4.1 Study area

The 12,500 km^2 study area is located in eastern Canada, southern Quebec (Figure 30). It is in fact an extension of the Montérégie Est area (9,000 km^2), which has recently been investigated in the context of a regional groundwater resources assessment project (Carrier *et al.*, 2013), that was carried out from 2009 to 2013 as part of Quebec government's systematic groundwater resources assessment program ("PACES") which involved Quebec universities in partnership with regional organizations (Ouellet *et al.*, 2011; Palmer *et al.*, 2011). The Montérégie Est area has a total population of about 800,000 inhabitants. Groundwater is the main source of drinking water for most of the municipalities with less than 5,000 inhabitants (Carrier *et al.*, 2013). There are more than 35,000 reported private water wells in the study area, about 90 % of which are open boreholes tapping the regional fractured-rock aquifer system. The study area is divided into three main zones, or hydrogeological contexts, based on the geological provinces and tectonostratigraphy of southern Quebec: a St. Lawrence Platform zone, an Appalachians External Humber Zone, and an Appalachians Internal Humber Zone (Williams, 1979; Williams, 1995; Tremblay & Pinet, 2016). Consistent with the objectives of the study, the focus is on the shallow bedrock aquifer. Overall, main lithologies of the bedrock comprise shales, dolomites, limestones, siltstones, and sandstones (Slivitzky & St-Julien, 1985; Globensky, 1987; Thériault & Beauséjour, 2012). Recent analysis of field data confirmed that the bedrock is significantly more fractured in the first tens of meters of depth, thereby suggesting an overall decrease in fracture density with increasing depth in rock (Ladevèze *et al.*, 2013). There are significant differences in the geologic history between the three zones, which thus justify the division of the study area according to these three zones. In the Appalachians, sedimentary rock formations underwent significant orogenic deformation —including folding, thrust faulting, and fracturing— as well as low-grade metamorphism (Castonguay *et al.*, 2010), both being more intense in the Internal Humber Zone than in the External Humber Zone (Slivitzky & St-Julien, 1985). In contrast, sedimentary rocks of the St. Lawrence Platform underwent little deformation (Globensky, 1987). Furthermore, since the study focuses on the shallow bedrock (i.e. $z \leq 100$ m), the nature of the basement rock lying beneath the thick (>1 km) cover of sedimentary rocks is simply disregarded.

The surficial sediments overlying the bedrock are Late Quaternary in age and their depositional history is essentially related to the last glaciation-deglaciation events. Within the Montérégie Est

area, the sediment cover is thickest in the northern part of the St. Lawrence Platform zone, to the north of the Monteregian Hills, where it is ~30 m thick on average and largely dominated by glaciomarine silts and clays, thus implying extensive mainly confined conditions in this zone. This part of the study area is also characterized by brackish groundwater (with TDS concentrations about 0–12 g/L), which makes the local groundwater resource unsuitable for domestic water supply (Beaudry *et al.*, 2018). Further south and east, the sediment cover is thinner (~0–10 m), generally dominated by tills, and hence relatively permeable, especially in the Appalachians where the tills are less compact, therefore rather implying mostly semi-confined to unconfined conditions. Groundwater quality is overall very good in the Appalachians as well as in the southern part of the St. Lawrence Platform zone. This partly explains why water wells are much more numerous there than in the northern part of the St. Lawrence Platform zone (see the uneven spatial distribution of black dots in Figure 30).

The key asset of this area, in the context of the present study, is that abundant data related to the hydrogeology of the region are readily available. These data especially include 18,313 usable SC test data (indicated as black dots in Figure 30) originally reported in a public water well database called in French the “Système d’information hydrogéologique”, and managed by Quebec Ministry of the Environment since 1967 (Gouvernement du Québec, 2017). Note that these input SC data are provided in Annexe A7.8.

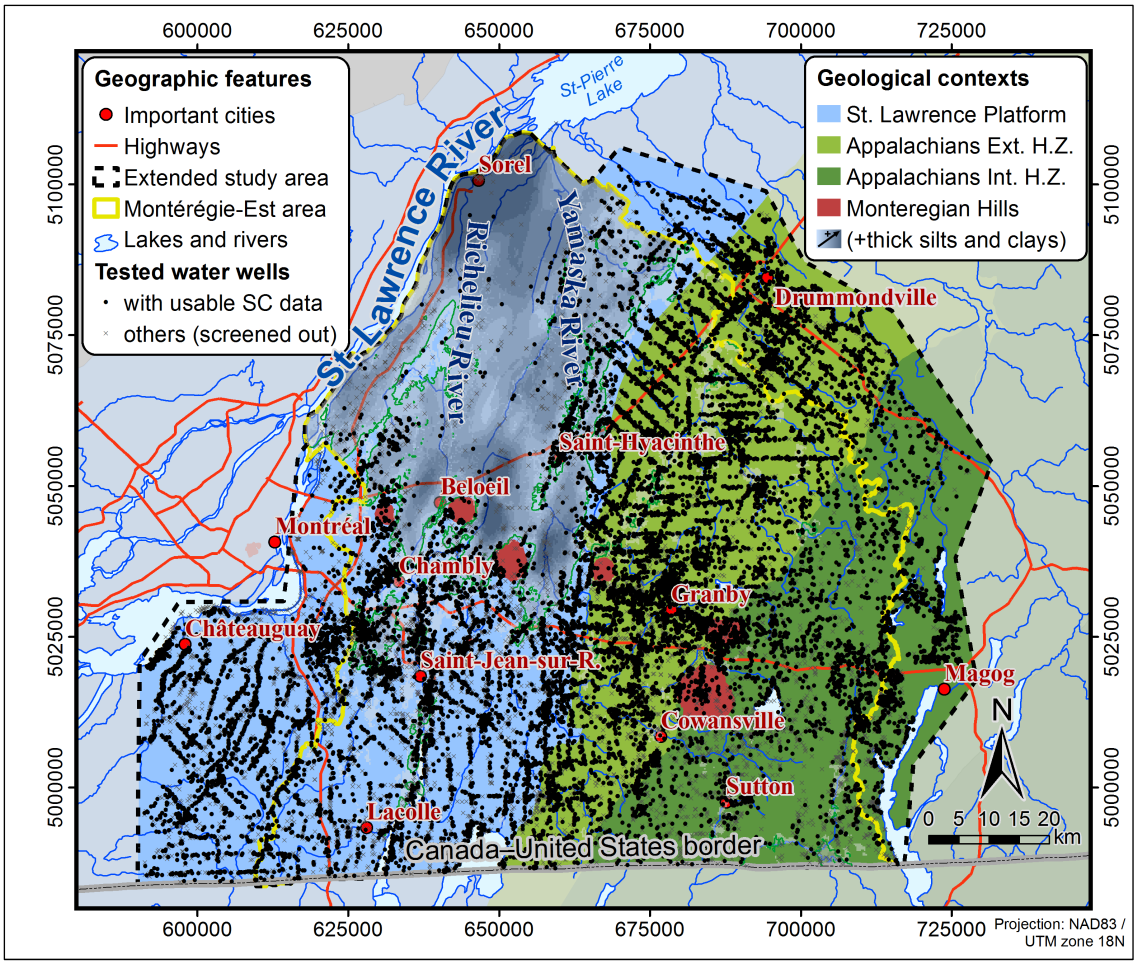


Figure 30: Overview of the study area.

4.2 Implementation of the methodology

The stochastic modeling workflow described in Section 3.1 was implemented in a case study using the transmissivity estimates from the specific capacity data of the study area. The primary purpose of this implementation was to test the capacity of the stochastic modeling workflow to infer characteristics about the vertical spatial variability of fracture properties and bulk-rock hydraulic conductivity (K_b) throughout the regional fractured-rock aquifer system in the study area. The workflow was applied in each of the zones representing different hydrogeological contexts, one zone at a time. Since a strong decrease in transmissivity with well depth is seen in the dataset of the study area (Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-a) (Chapter 6), this case study provides a good test of the stochastic modeling workflow regarding its capability to consider both the well-

drillers' sampling bias and the limited reliability of T(SC) estimates. Known differences between zones in terms of geological conditions (Carrier *et al.*, 2013), drilling depths (Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-a) and fracture network patterns (Ladevèze *et al.*, 2013) provided also an ideal test of how the practical goal of regional hydraulic characterization could actually be achieved.

The next subsections describe how each step of the workflow was implemented for this case study. Yet, note that although the basic (practical) workflow was in fact implemented on a per-zone basis (as recommended in Section 3.1, Step W1), application of each step is described only once, and the relevant data are presented either for all zones simultaneously or for one example zone only, for the sake of simplicity.

Applying Step W1: Gathering of the required input data

The first step consisted in gathering the input data that are necessary for preparing the calibration data, namely well transmissivity estimates ($\log T_{\mathrm{w}}$) and well depth in rock (d_{w}) paired data. Yet for demonstration purposes, mixed indications (quantitative or else qualitative) about actual well transmissivity ($\log T_{\mathrm{w}}^{*}$) were also considered in this specific section of the case study. Only the d_{w} data series were directly available in the regional database; the other two data series needed to be prepared. This was done through implementation of the "data processing workflow" approach described in Laurencelle & Lefebvre (2018, in prep.-a) (Chapter 6), using the Papadopulos-Cooper-based estimation method, which resulted in a global dataset of 18,313 rows including both raw $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates and mixed indications about $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ ($\log T_{\mathrm{w}(<|\approx|>)}^{*}$) —derived from reliability-aware interpretation of SC data— along with d_{w} data. There are three types of indications about $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$: i) qualitative indications that the $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ is most likely below the indicator value (hence the symbol '<' is used for these data points); ii) quantitative indications that the $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ is most likely around the indicator value ('≈'); iii) qualitative indications that the $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ is most likely above the indicator value ('>').

Then, the main geological zones of the study area were considered for preparing the location data, which were then added to the global dataset as a categorical variable of "zone" having three possible values: "St. Lawrence Platform" (abbrev. as 'StLP'), "Appalachians External Humber Zone" ('AppExtHZ'), or "Appalachians Internal Humber Zone" ('AppIntHZ').

Then, based on the combination of SC test parameters most frequently reported in the regional database of the Montérégie-Est extended area: Q = 3.78×10^{-4} m^3/s (22.7 L/min = 6 US gpm),

t_f = 3600 s (1 h), r_w = 0.0762 m (3 in), and S = 5×10^{-3} (for semi-confined conditions): values from Table 4 in Laurencelle & Lefebvre (2018, in prep.-a) (Chapter 6); one most typical and thus "global quantitatively reliable range" (gQRR) was determined for the whole study area: gQRR = [-5.49, -3.15], in $\log T_w^*$ units from m^2/s (results from Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-a) (Section 5.2.2 of Chapter 6). Finally, to complete Step W1, the global dataset was split by zone, thereby forming three separate zonal datasets of $\log T_w$, $\log T_{w(<|\approx|>)}^*$, d_w data.

Figure 31 shows these three zonal datasets. Graphs of the upper row present the $\log T_{w(<|\approx|>)}^*$, d_w data, considered here essentially for demonstration purposes, while graphs of the lower row present the $\log T_w$, d_w data, i.e. the input data actually required. Several observations can be made. In Figure 31a, most of the '<' point symbols concentrate near (or else below) the lower bound of the gQRR, most of the '>' point symbols concentrate near (or else above) the upper bound of the gQRR, while the vast majority of the '≈' point symbols falls in between these two bounds (i.e. inside the gQRR). Similarly, in Figure 31b, most of the raw $\log T_w$ estimates falling either below or above the gQRR actually correspond to '<' or '>' indications, respectively. These two observations demonstrate that the assumptions to be made in next step (W2) are actually reasonable. Figure 31 indeed confirms that virtually all $\log T_w$ estimates falling inside the gQRR are effectively quantitatively reliable (QR), that all $\log T_w$ estimates falling below the gQRR are lower or indefinitely lower than the lower bound of the gQRR, and that all $\log T_w$ estimates falling above the gQRR are higher or indefinitely higher than the upper bound of the gQRR. On another note, the arrangement of the QR data points in all three graphs of Figure 31a systematically reveal a decreasing trend of $\log T_w^*(d_w)$, although the trend is harder to assess below a few tens of meters deep, where the proportion of non-QR estimates becomes very important. Figure 31 further informs that the number of data points (also shown in the upper left corner of each zone) is similarly high for the first two zones (StLP: n = 7403; AppExtHZ: n = 7765) but about three times lower for the third zone (AppIntHZ: n = 2721), which reflects the population density of these zones.

This input data analysis, involving $\log T_{w(<|\approx|>)}^*$ data in parallel with the basic $\log T_w$ data, demonstrates that the computation method described in Step W2 of the workflow (Section 3.1) for preparing the $\log T_w^*$-based calibration data is appropriate. Although this demonstration is a priori specific to this case study, the authors surmise that the outcomes of this demonstration are generally applicable. Therefore, it appears appropriate to carry out Step W1 by following the instructions provided in Section 3.1, i.e. to simply gather the required $\log T_w$, d_w, and zone data without carrying out any further processing or analysis.

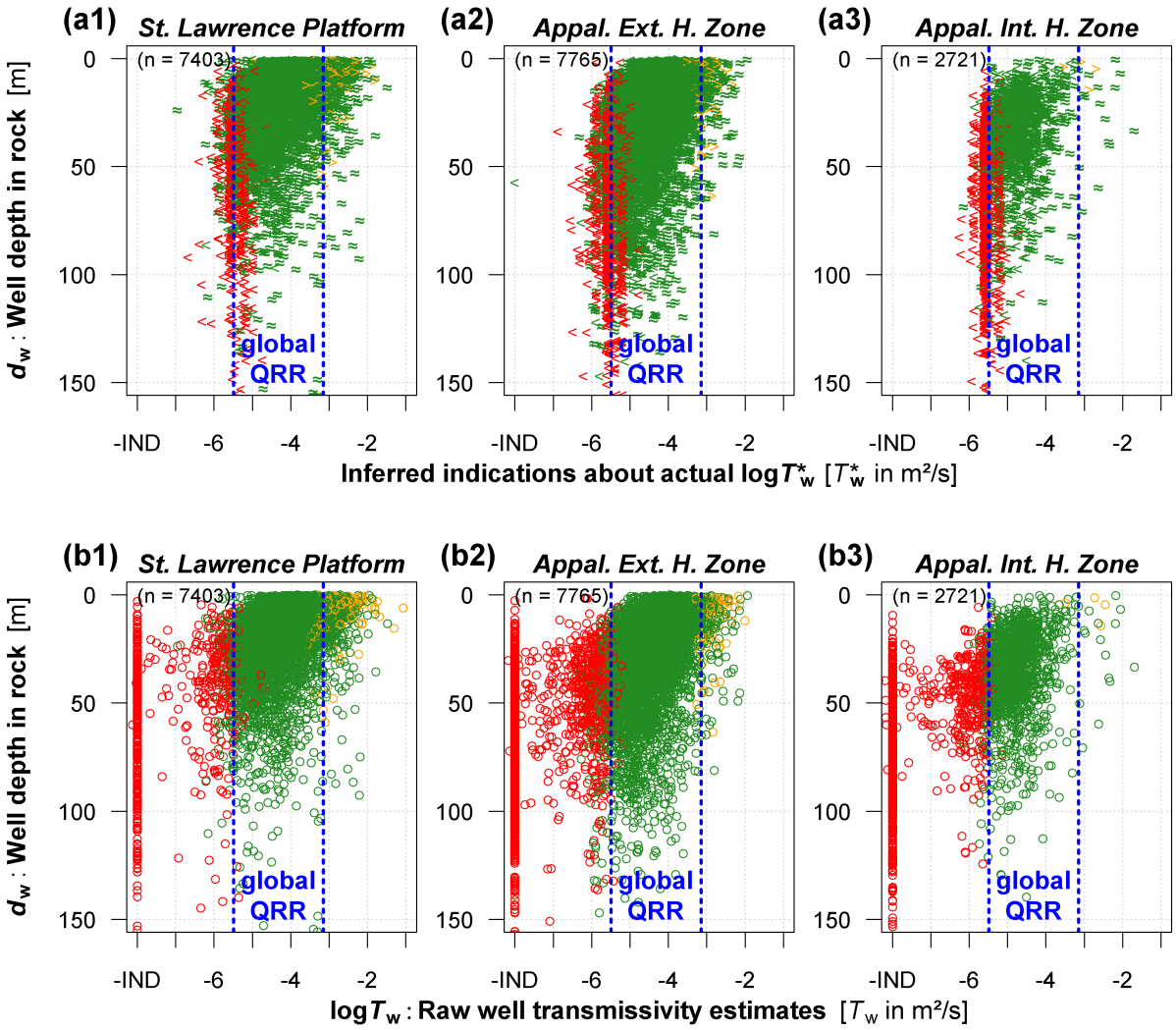


Figure 31: Overview of the required input data, for the case study, presented in two forms. (a) Scatter plots of inferred indications about actual well transmissivity ($\log T^*_{w(<|\approx|>)}$) against well depth in rock (d_w), for each of the three main geological zones in the Montérégie-Est extended area. The quantitative indications giving quantitatively reliable estimates of $\log T^*_w$ are drawn as green '≈' point symbols, whereas the qualitative-only indications giving either the upper or the lower limit of the most probable range for $\log T^*_w$ are respectively drawn as red '<' or orange '>' point symbols. Thus, the X coordinates are effectively equivalent to raw $\log T_w$ estimates only for the $\log T^*_{w(\approx)}$ data points. (b) Scatter plots of raw $\log T_w$ estimates against well depth in rock (d_w), for each of the three main geological zones in the study area. All data points are drawn as small circles, the colors of which are still based on the mixed indications about $\log T^*_w$ as in graphs of the upper row, hence: red from '<', green from '≈', and orange from '>'. The number of data points for each zone is shown in the upper left corner of each graph. The bounds of the global quantitatively reliable range (gQRR) are indicated by two dashed blue vertical lines, in each graph (gQRR = [-5.49, -3.15] for all three zones). Data points positioned at X = -8 in fact correspond to indeterminate (but low) estimates, hence the X tick mark specially labeled '-IND'.

Applying Step W2: Preparation of the calibration data

The second step consisted in preparing the main "observed data" used for model calibration for each zone. Two types of calibration data were thus prepared: well density vertical profiles, and quantile statistics about $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ within each depth interval.

A vertical profile of well density, $\mathrm{wd}(d_{\mathrm{w}})$, was computed for each zone, using a depth interval of a regular width of 2.0 m. It was chosen to express wd as a percentage. A vertical profile of cumulative well density, $\mathrm{wd}_{\mathrm{cum}}(d_{\mathrm{w}})$, was then derived for each zone, from the $\mathrm{wd}(d_{\mathrm{w}})$ profile data. Figure 35b (in Section 4.3) shows the $\mathrm{wd}(d_{\mathrm{w}})$ profiles thus prepared, as one blue curve for each zone, while an example of a $\mathrm{wd}_{\mathrm{cum}}(d_{\mathrm{w}})$ profile is shown in Annexe A7.3. The fact that the computed $\mathrm{wd}(d_{\mathrm{w}})$ profiles had very different shapes from one zone to another actually confirmed the importance of considering the vertical profiles of well density as essential calibration targets.

The computational procedure described in the second part of Step W2 of the workflow (Section 3.1) was then applied, in order to prepare quantile statistics about actual well transmissivity ($\log T_{\mathrm{w}}^{*}$), per depth interval and separately for each zone, using a regular depth-interval width of 10.0 m. Ten ECDF's, one per depth interval, were thus computed, and then truncated using the global quantitatively reliable range determined at the previously step (W1), gQRR = [-5.56, -3.13]. The ten truncated ECDF's were then translated into as many truncated EQF's, to make it easier to extract QR quantiles of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ at precise P values. Seven precise P values (0.05, 0.10, 0.25, 0.50, 0.75, 0.90, and 0.95) were then considered for the purpose of preparing additional calibration targets for $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$.

Figure 32 summarizes the overall process for the preparation of the $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ calibration data, but only for one of the three zones (St. Lawrence Platform). Figure 32a shows the raw $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates from which the ECDF's were computed, and also the additional calibration targets that were prepared based on the seven P values mentioned above. Figure 32b shows the ECDF's and truncated ECDF's that were computed for each of the ten depth intervals, thereby highlighting that the lowest P value of each truncated ECDF increases with d_{w}, as the proportion of $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates falling below the gQRR grows with d_{w}. The range of P over which "observed" quantile statistics about $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ are available is thus much more limited for the deeper than for the shallower depth intervals. This means that calibration of the simulated statistics about $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ will likely have to concentrate on the shallower depth intervals.

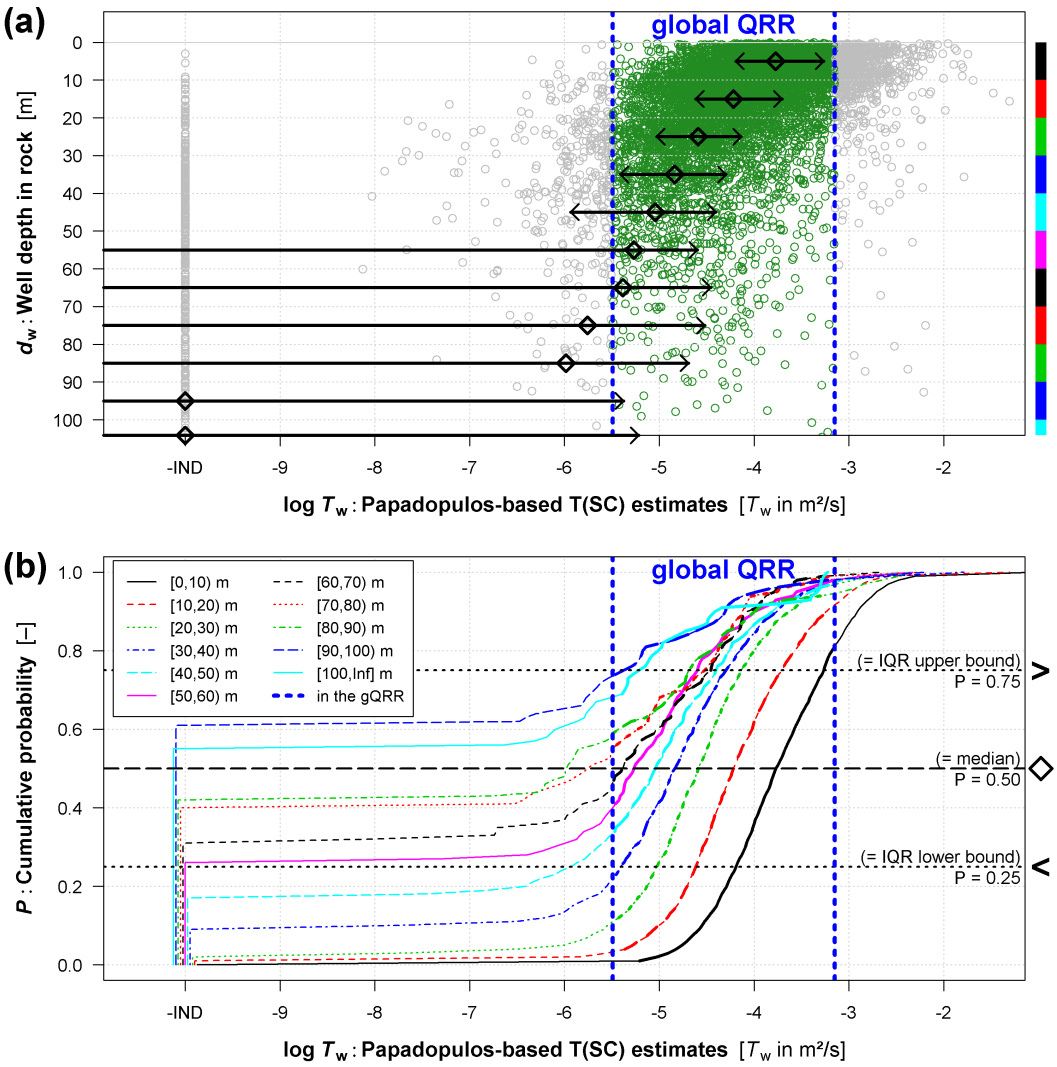


Figure 32: Graphical presentation in two complementary ways of the $\log T_w, d_w$ input data to illustrate the implementation of the second step of the stochastic modeling workflow (Step W2) for one of the three zones of the study area: the St. Lawrence Platform. The $\log T_w$ data are actually the raw T(SC) estimates that were derived from the SC data using the Papadopulos-Cooper-based estimation method from Laurencelle & Lefebvre (2018, in prep.-a) (Chapter 6). In the two graphs, the "global quantitatively reliable range" (gQRR) is delineated by two blue dashed vertical lines. (a) Scatter graph of $\log T_w, d_w$ data points. Only points falling inside the gQRR are drawn in green, the rest in light gray. Up to three quartiles are indicated per 10-m depth interval: the quartile Q2, better known as the median (P = 0.50), is drawn as a black diamond, while the quartiles Q1 (P = 0.25) and Q3 (P = 0.75) are respectively indicated by left and right arrow heads. The horizontal black segments emphasize the interquartile range (IQR) for each depth interval. (b) Empirical cumulative distribution functions (ECDF's), computed separately for each depth interval. The portion of each ECDF curve that is inside the gQRR is drawn thicker, and constitutes the second type of calibration data. The seven precise P values, defined expressly for the purpose of preparing additional calibration targets for $\log T_w^*$, are indicated as straight horizontal black lines. The color scheme used for the depth intervals is first shown to the right of graph a, and then used for drawing the curves in graph b, in which the depth intervals are further described in a legend panel. In either graph, data points and derived statistics positioned at X = -10 in fact correspond to indeterminate (but low) estimates, hence the X tick mark specially labeled '-IND'.

Applying Step W3: Initial setup of the stochastic model

The third step consisted in setting up the stochastic model by initializing its several parameters. Firstly, the main global parameters of the model (as defined earlier, in Section 3.2.1) were fixed. The maximum depth of the simulation domain was set to $Z_{\max}$ = 100.0 m, in view of the fact that the open-hole wells almost all end at depths in rock lower than 100.0 m (see Figure 32a, or Figure 35b). The depth interval for random fracture generation was set to Δz_{fgen} = 1.0 m, leading to the discretization of the 1D-z simulation domain into $n_{\mathrm{di.fg}}$ = 100 small regular intervals (strictly for the purpose of random fracture generation). The number of fractured-rock aquifer columns and virtual wells to simulate was set to n_{w} = 10,000, a number of realizations that proved to provide stable statistics of fracture properties. All Boolean parameters of the stochastic model (as defined in Table 16.C, in Section 3.2.2) were switched on (i.e. set to ✓), notably including the drilling mode which was thus set to "biased" (DM = ✓). Together, these values assigned to the global parameters defined the "default" setup for the global parameters.

Secondly, the stochastic parameters of the model were defined based on the mathematical formulas provided in Table 16, further using the recommended equations and algorithms for the three reference terms concerned: Equation 25 to define $\mathrm{fd}^*(z)$; Equation 26 to define $b_{\mathrm{f}}^*(z_{\mathrm{f}})$; the empirical formula proposed in Annexe A7.2 to define $\Delta d_{\mathrm{dwmax}}^*(d_{\mathrm{w.min}})$; and the computer algorithm again proposed in Annexe A7.2 to define $T_{\mathrm{w.target}}^{**}(s_{\mathrm{w.a}})$.

Thirdly, the sub-parameters involved in the various formulas defining the stochastic parameters were initialized. Most of these sub-parameters were initialized on an arbitrary basis by assigning a priori plausible best-guess values to them, yet in certain specific cases, field-derived information was found in the scientific literature that allowed the assignment of a priori more realistic values. The arbitrary initial values are not reported in the paper, however, because they become no more relevant once model calibration is achieved and calibrated values are available for all of the sub-parameters —only the few field-derived initial values are reported in the text below.

Two of the three vertical-distance "Δz…" stochastic variables required by stochastic parameters of the drilling submodel ($T_{\mathrm{w.target}}^*$ and $d_{\mathrm{w.min}}$) were defined empirically: Δz_{sed} and Δz_{stat}. As instructed in Step W3 of the workflow (Section 3.1), empirical distributions were prepared to summarize the field-derived data from each type. Figure 33 presents the resulting ECDF's for the two empirically-defined Δz_{sed} and Δz_{stat} stochastic variables.

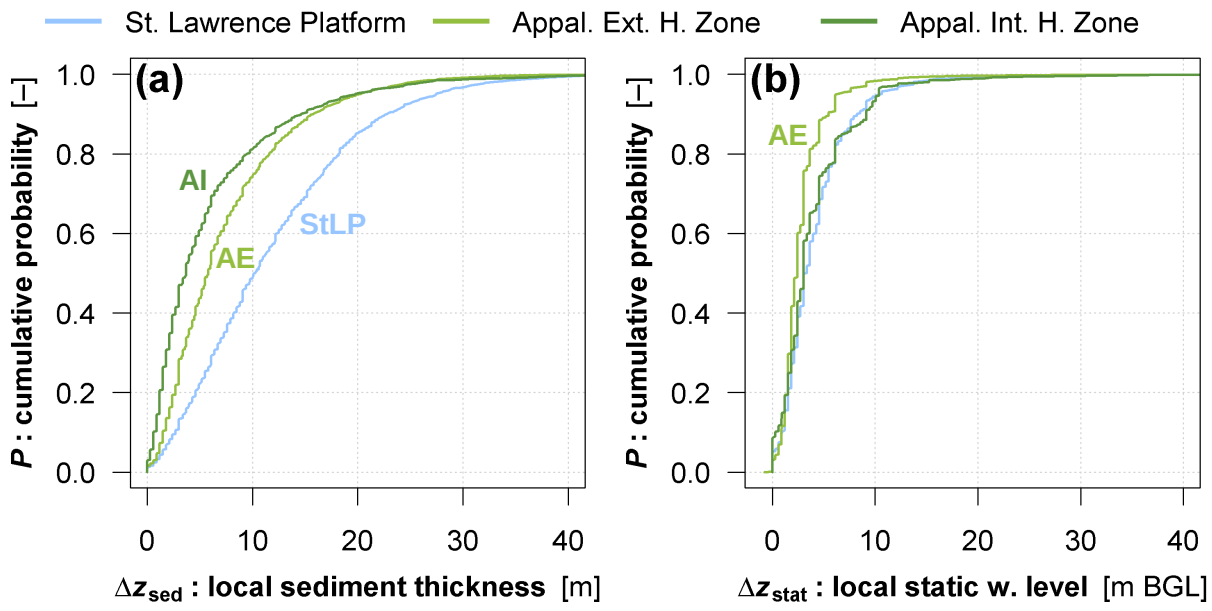


Figure 33: Empirical cumulative distribution functions (ECDF's) defining two of the three vertical-distance ("Δz…") stochastic variables for each zone of the study area: (a) the local thickness of unconsolidated sediments overlying the rock aquifer (Δz_{sed}); (b) the local depth of the static water level relative to the ground (Δz_{stat}).

Differently, the third vertical-distance variable, Δz_{pump}, was rather defined by a single constant and arbitrary value of 1.0 m, due to the fact that the location of the pump within the well during the SC test was a scarcely reported information in the regional database of this study area. Using a low value of 1.0 m from the base of the well for Δz_{pump} puts less constraint on the theoretically available drawdown in the well.

The reference term $\mathrm{fd}^*(z)$, defining the reference decreasing trend of fracture density with depth in rock, could also be initialized based on field-derived data. Indeed, structural information on the variable density of fractures in the shallow bedrock were available from geophysical borehole logging conducted not only in the Montérégie Est area (Laurencelle *et al.*, 2011; Crow *et al.*, 2013; Ladevèze *et al.*, 2013) (Annexe A0.2) but also in the St-Édouard area (Crow & Ladevèze, 2015; Ladevèze *et al.*, 2016; Ladevèze *et al.*, 2018), another area of southern Quebec straddling the St. Lawrence Platform and Appalachian External Humber Zone tectonostratigraphic zones, hence in a geological setting very similar to our study area. The St-Édouard area was considered in addition to the present study area because the depth range of boreholes from the Montérégie Est area was too limited. In these studies, apparently open fractures were pinpointed in optical- and acoustic-televiewer logs of the boreholes, through visual inspection, and reported in the form of

fracture depth in rock (z_f) data. Point values of fracture density (fd) with respect to z were computed from the z_f data, and a nonlinear curve based on Equation 25 was then adjusted to the fd, z point data through nonlinear regression analysis (see Figure 34 below). The best-fit parameters for Equation 25 were thus used to set the initial values for the sub-parameters related to the reference term $\mathrm{fd}^*(z)$, to: fd_0 = 1.2, fd_∞ = 0.025, and λ_{fd} = 0.040. Moreover, in spite of the small number of available borehole logs, the overall variation of fd about the average depth trend of fd was assessed visually, which allowed to propose the following initial values for the lower (L) and upper (U) bounds of the related heterogeneity term H_{fd}: L = 0.5, and U = 1.5, that is, fluctuations by ±50 % around the average. Overall, the good fit obtained with the $\mathrm{fd}^*(z)$ curve in Figure 34 confirms that a decreasing trend of fd with z can be very consistent with observations in an actual fractured-rock aquifer system.

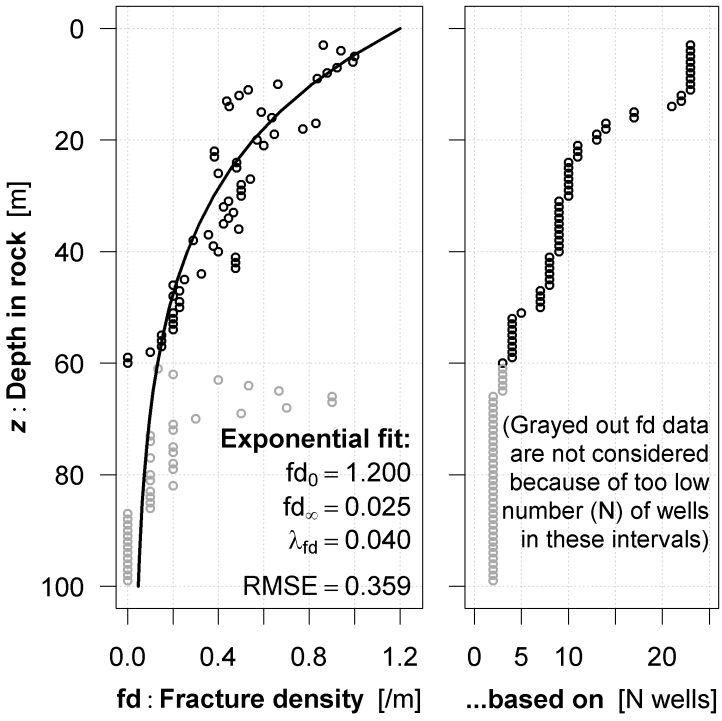


Figure 34: Decreasing trend of fracture density (fd) with depth in rock (*z*) derived from structural logging of 23 open boreholes drilled in the regional fractured-rock aquifer systems of Montérégie-Est and St-Édouard areas, both located within the St. Lawrence Valley (in southern Quebec). The data points represent average fd values computed on a per-depth-interval basis, through processing of the field-derived fracture depth-in-rock (z_f) data. The thick black curve shows the empirical model derived from these structural data, which defines the reference term $\mathrm{fd}^*(z)$ that is a key component of the fractured-rock generation submodel of the stochastic model. The data presented here comes from several field studies related either to the Montérégie Est area (Laurencelle *et al.*, 2011; Carrier *et al.*, 2013; Crow *et al.*, 2013; Ladevèze *et al.*, 2013) or to the St-Édouard area (Crow & Ladevèze, 2015; Ladevèze *et al.*, 2016; Ladevèze *et al.*, 2018). The R code and input data used to prepare the figure can be found in Annexe A7.7 and Annexe A7.8, respectively.

The reference term for the hydraulic conductivity of the rock matrix (K_{m}^{*}) was defined by a constant value that was derived from statistics about the permeability of core samples from deep hydrocarbon exploration wells drilled in the Bécancour area —also in the St. Lawrence Platform, in southern Quebec— through rock units that are also present in our study area, namely: Trenton, Beauharnois, Theresa, Cairnside, and Covey Hill. An overall representative value for these five rock units was inferred from the reported median permeability data from each of these five rock units (in Tran Ngoc *et al.*, 2014, their Fig. 10). A rounded representative permeability value of 1×10^{-16} m^2 was thus estimated, and used to define the reference term: $K_{\mathrm{m}}^{*} = 1\times10^{-9}$ m/s.

Applying Step W4: Optimization loop for model calibration

The fourth step consisted in carrying out the manual iterative calibration process. It was first applied to prepare a calibrated stochastic model for the St. Lawrence Platform (StLP) zone. To do so, numerous alterations of the sub-parameters were tested, firstly to qualitatively explore the relative influence of the various sub-parameters on the simulated data, and then to effectively improve the fit of the simulated data against the observed data from the StLP zone until a visually satisfying fit was obtained. A systematic parametric study was carried out after the calibration process (Section 4.3.2). The optimized sub-parameter values were then saved, thus constituting the set of values that defined the calibrated model for the StLP zone. Subsequently, calibrated stochastic models were prepared for the other two zones of Appalachian External and Internal Humber Zones (AppExtHZ and AppIntHZ), by starting with the calibrated values from the StLP zone as initial values for the sub-parameters. This way, the number of sub-parameters needing to be optimized was considerably reduced. Based, as a start, on the assumption that the well drillers' multi-criteria decision-making process (and hence the drilling submodel) does not change significantly from a zone to another, the sub-parameters to optimize were firstly selected among those from the fractured-rock generation submodel: controlling fracture density (fd_0, λ_{fd}), and fracture aperture (b_{f0}). However, in order to obtain a satisfying fit for the AppIntHZ zone, it was necessary, still, to re-optimize two sub-parameters from the drilling submodel ($\Delta z_{\mathrm{dh.min}}^{*}$, σ), both related to the minimum total drill hole depth ($\Delta z_{\mathrm{dh.min}}$) stochastic parameter.

Table 17 lists all sub-parameters of the stochastic model, presents the considered range (deemed a priori plausible) within which each sub-parameter was allowed to vary through the manual calibration processes, and reports the calibrated value finally obtained for each sub-parameter (either a unique value or one distinct value per zone). The implications, in terms of fractured

medium properties and drilling depths in rock, of the distinct parameters used for each zone will be discussed on the basis of the graphs and statistics produced in the next step (W5) that are shown in Section 4.3 documenting the results obtained.

Moreover, additional methodological tools were developed and used to help assess the goodness of fit of the model during and after the manual calibration process. These tools allowed the preparation of diagnostic graphs and the computation of various quantitative indicators of goodness of fit from the model outputs after each run of the stochastic model, which were checked frequently in order to monitor the variations in the quality of the fit following each attempt of optimization of some sets of sub-parameters. Several of these methodological tools are presented in Annexe A7.3.

Table 17: Considered range and calibrated values for the sub-parameters of the stochastic model. Most sub-parameters have the same calibrated value for all three zones of the study area, yet a few of them have different optimal values for each zone, in which cases three values, separated by vertical bars, respectively denote the calibrated values for the St. Lawrence Platform (StLP), Appalachians External Humber Zone (AppExtHZ), and Appal. Internal Humber Zone (AppIntHZ).

Stochastic parameter and sub-parameters	Units	Considered range (a priori plausible)	Calibrated value (general or per zone)
$\mathrm{fd} \Leftrightarrow n_\mathrm{f}$			
fd_0	m^{-1}	0.10–4.0	0.72 | 0.36 | 0.24
fd_∞	m^{-1}	0.00–1.0	0.025
λ_fd	–	0.010–0.50	0.040 | 0.040 | 0.020
α, β	–	2.0–20.0	4.0, 4.0
L, U	–	0.01–10.0	0.25, 1.75
b_f			
$b_{\mathrm{f}0}$	µm	10–1000	133 | 122 | 88.9
$b_\mathrm{fr}/b_{\mathrm{f}0}$	–	0.01–0.50	0.10
z_c	m	5.0–500.0	50.0
α	–	0.20–20.0	1.7
L, U	–	0.0005–50.0	0.001, 20
x_0	–	0.00–1.00	0.846
σ	–	0.050–1.0	0.70
K_m			
K_m^*	m/s	1×10^{-10} – 1×10^{-8}	1×10^{-9}
$\Delta z_{\mathrm{dh.min}} \Leftrightarrow d_{\mathrm{w.min}}$			
$\Delta z_{\mathrm{dh.min}}^*$	m	1.0–50.0	10.0 | 10.0 | 25.0
$c_{\Delta\mathrm{zp}}^*$	–	1.0–10.0	1.5
σ	–	0.050–1.0	0.4 | 0.4 | 0.6
$d_{\mathrm{w.max}}$			
Δ_min	m	1.0–10.0	2.0
p_add	m	1.0–100.0	10.0
p_num	m	1.0–500.0	100.0
p_mult	–	1.0–50.0	15.0
p_exp	–	0.1–1.0	0.6
k	–	1.0–10.0	2.0
θ	–	0.1–1.0	0.5
$T_{\mathrm{w.target}}^*$			
daily water usage †	L	500–5000 (total)	2000 =
- background demand	L	100–1000	500 (per day) +
- extra pumped water during peak hours	L	400–4000	750 (7h00–8h00) + 750 (20h30–21h30)
σ	–	0.050–1.0	0.5
Δz_sed			
empirical definition	m	one EQF for each…	…zone
Δz_stat			
empirical definition	m	one EQF for each…	…zone
Δz_pump			
arbitrary definition	m	1.0 (fixed)	1.0 (global constant)

† Refer to Annexe A7.2 for more details about the parameterization of the computer algorithm.

Applying Step W5: Practical exploitation of model results

Finally, once a calibrated stochastic model had been obtained for each of the three zones of the study area, various graphs and statistics were prepared from the model results (Section 4.3.1). Additional stochastic simulations were then carried out, using the optimized parameterization of the calibrated model from the StLP zone as the reference parameterization, to systematically assess the roles and impacts of various global parameters or sub-parameters of the stochastic model. These additional investigations, which provide insights into many aspects of the research problem, are presented in Sections 4.3.2 and 4.3.3.

4.3 Results

This section now presents the results of the implementation of the methodology proposed in this paper to the study area. It is worth noting that although the results which follow are related to a specific study area, they nonetheless provide the basis for several valuable general outcomes.

4.3.1 Calibrated simulations and bulk-rock K(z) inference for each zone of the study area

As obtained through the full implementation of the stochastic modeling workflow described in Section 3.1, this section presents and discusses the main results of the stochastic model calibrated separately for each of the three geological zones of the study area.

Graphical results in Figure 35 show data of two main types: data related to the wells (graphs of columns a – c), and data related to the fractured rock medium (graph of column d). Figure 35a and 35b verify the quality of model calibration, Figure 35c highlights the contrast between $\log T_{\mathrm{w}}^{*}\,(d_{\mathrm{w}})$ trends from biased versus unbiased sampling, and Figure 35d shows various inferred statistics on bulk hydraulic conductivity ($\log K_{\mathrm{b}}$) representing the real fractured-rock aquifer system within each zone.

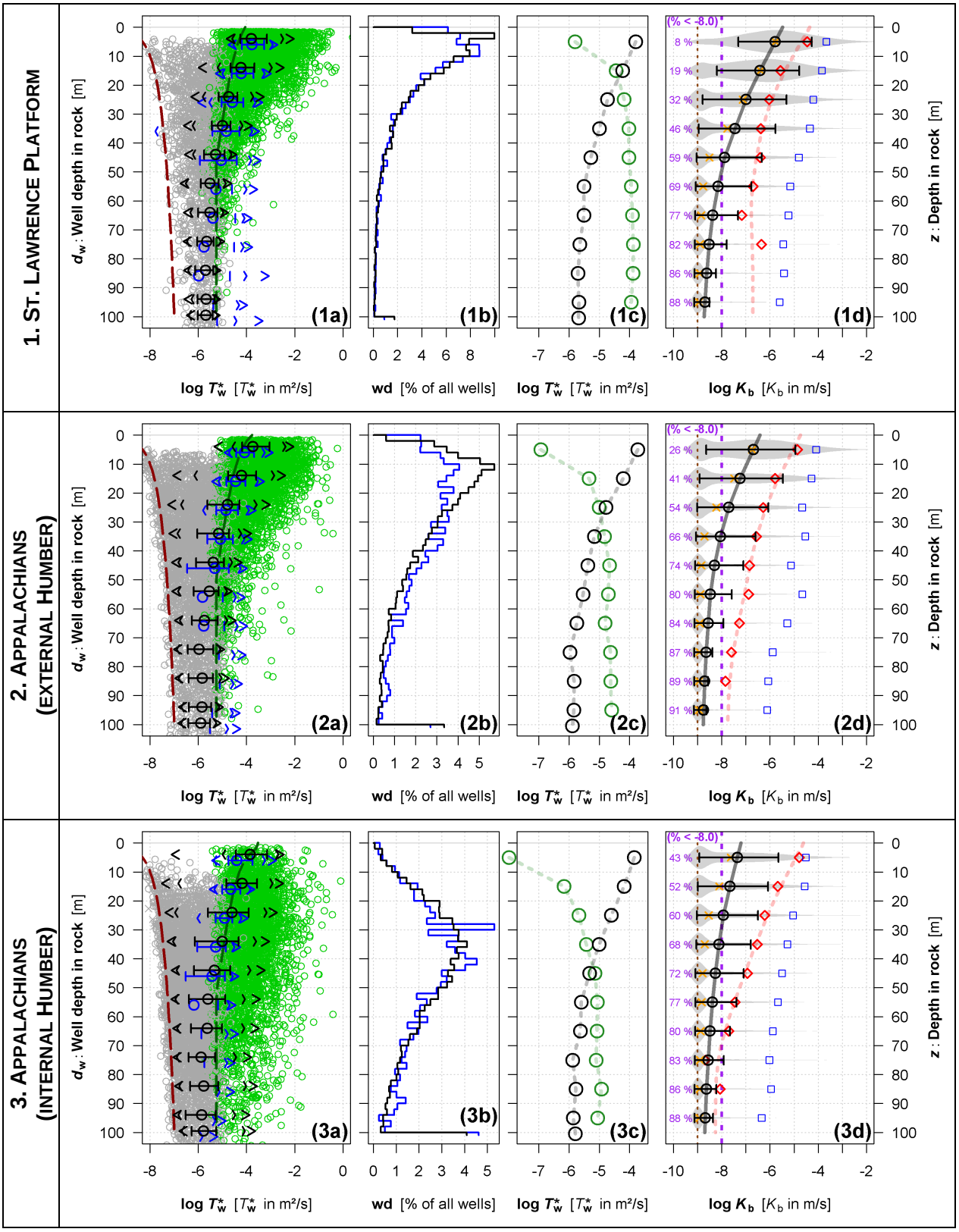


Figure 35: Main graphical results of the calibrated stochastic simulation for each of the three zones of the Montérégie-Est extended area: (1) St. Lawrence Platform (StLP) zone; (2) Appalachians – External Humber Zone (AppExtHZ); (3) Appalachians – Internal Humber Zone (AppIntHZ). (a) Scatter

graph of simulated well transmissivity ($\log T_{\mathrm{w}}^{*}$) against well depth in rock (d_{w}). Green circles represent simulated wells which have met the satisfying T_{w}^{*} criterion, whereas gray circles denote simulated wells that have not. The dark green curve illustrates the average model for the drillers' satisfying T_{w}^{*} criterion 'C2' (which depends in fact on $s_{\mathrm{w.a}}$ and thus indirectly on d_{w}, as defined in Section 2.3 while also considering Equation 23a). The dark red curve illustrates the reference model for the ~minimum T_{w}^{*} resulting from rock matrix hydraulic conductivity only (i.e. in absence of fractures), as the open borehole length (≈ d_{w}) increases. The other features provide information about the distribution of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ within each depth interval, in the form of calculated discrete quantiles; black features relate to simulated results, while blue features relate to observed data (and are slightly shifted downwards for sake of clarity). Large circles indicate medians, while arrow-head symbols indicate up to six other percentiles of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ (calculated at P values of 0.05, 0.10, 0.25, 0.75, 0.90, and 0.95), for each depth interval. The horizontal segments highlight the interquartile ranges ($0.25 < P < 0.75$) of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ for each depth interval (a segment is drawn only when both bounds of the range are determinate). (b) Distribution of the proportions of well depths, wd (%), within an interval of well depth in rock (d_{w}), expressed as the percentage of wells ending in each small depth interval of 2.0 m width, including a last half-unbounded interval for all wells ending at $d_{\mathrm{w}} \geq 100$ m. The black curve and the blue curve show the distribution respectively for simulated results and observed data. (c) Comparison of calculated vertical profiles of median $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ as a function of depth in rock (d_{w}), resulting from biased sampling (black) vs. unbiased sampling (green). (d) Distribution (and overall trend) of bulk hydraulic conductivity (K_{b}) as a function of depth in rock (z), inferred from post-processing of stochastic simulation results. Gray violins illustrate the smooth statistical distribution of $\log K_{\mathrm{b}}$ within each depth interval. The dark-brown dashed vertical line locates the reference value for the hydraulic conductivity of the rock matrix ($\log K_{\mathrm{m}}^{*} = -9$). Black circles indicate the computed average $\log K_{\mathrm{b}}$ (i.e. geometric mean of K_{b}), black whiskers show the 68 % central-percentiles interval (roughly ±1 standard deviation) around the average $\log K_{\mathrm{b}}$, blue squares indicate the arithmetic mean of K_{b}, and orange cross symbols indicate the median K_{b}, within each depth interval. The thick black curve connecting the black circles thus represents the resolved $\log K_{\mathrm{b}}(z)$ trend model issued from full application of the workflow proposed in this study. Conversely, the red diamonds and its related red curve illustrate the alternative $\log K_{\mathrm{b}}(z)$ trend model that would be obtained by following the conventional approach instead of the proposed workflow.

The contents of Figure 35 are now examined in greater detail, one column at a time ('a' to 'd').

Figure 35a shows that simulated $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ values spread widely, especially at shallower depths in the rock aquifer. Overall, $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ values range within -8 to -1 in the top 0–10 m interval, whereas they concentrate within a much narrower range in the deepest 90–100 m interval (-7 to -5 for StLP and AppExtHZ, and -7 to -4 for AppIntHZ). The lower ends of simulated $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ values are clearly controlled by the K_{m} stochastic parameter: minimum $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ values indeed gather around the dashed dark-red curve describing depth-integrated hydraulic conductivity of the rock matrix, i.e. $\mathrm{X} = \log(K_{\mathrm{m}}^{*} d_{\mathrm{w}})$, $\mathrm{Y} = d_{\mathrm{w}}$. Differently, the upper ends of simulated $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ values are most likely controlled by complex interactions between several stochastic parameters related to fracture properties (primarily between $\mathrm{fd} \Rightarrow n_{\mathrm{f}}$ and $b_{\mathrm{f}} \Rightarrow T_{\mathrm{f}}$).

The reference model used to represent the depth-dependent minimum target for well transmissivity, $\log T_{\mathrm{w.target}}^{**}(s_{\mathrm{w.a}})$, that is the dashed dark-green curve in Figure 35a, roughly separates the simulated values into two main categories: "satisfying wells" (green circles), which

have met the satisfying productivity criterion C2, and “unsatisfying wells” (gray circles), that have not. Interestingly, dispersion of the $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ values is very broad within both categories. The satisfying wells show $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ values up to four orders of magnitude above the $\log T_{\mathrm{w.target}}^{**}(s_{\mathrm{w.a}})$ curve, while the unsatisfying wells show $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ values ranging between the $\log(K_{\mathrm{m}}^{*} d_{\mathrm{w}})$ lower limit and the $\log T_{\mathrm{w.target}}^{**}(s_{\mathrm{w.a}})$ upper limit. This highlights the systematic impact of the heterogeneity of fracture properties on well properties, and thus once again underscores that simulated well results are controlled by complex interactions between all active stochastic parameters.

Computed quantile statistics shown in Figure 35a also deserve explanations. First, the medians of simulated $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ are for the most part close to the medians of observed $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$, at least in shallower depth intervals. The fit of simulated to observed medians is best for the StLP zone, with signed differences comprised between -0.2 and +0.1, for the depth intervals within 0 m to 80 m in rock. The fit of medians is slightly weaker for the AppExtHZ zone, with differences comprised between -0.1 and +0.3, for the depth intervals within 0 m to 70 m in rock; and it is sensibly poorer for the AppIntHZ zone, with differences comprised between +0.15 and +0.6, for the depth intervals within 0 m to 60 m in rock. The systematically positive differences obtained for the AppIntHZ zone denote that the calibrated stochastic model —with its current parameterization as reported in Table 17— overestimates the depth-dependent central tendency of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ for that specific zone. In contrast, no such overestimation bias of the medians is noticeable for the other two zones. Moreover, several discrete quantiles other than the medians are compared in Figure 35a; those “discrete quantiles” actually correspond to the 5$^{\mathrm{th}}$, 10$^{\mathrm{th}}$, 25$^{\mathrm{th}}$, 75$^{\mathrm{th}}$, 90$^{\mathrm{th}}$, and 95$^{\mathrm{th}}$ percentiles of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ within each depth interval. The fit of simulated to observed discrete quantiles is, on the whole, much poorer than the fit of the medians. In fact, Figure 35a shows that the discrepancies between simulated and observed discrete quantiles generally increase with depth in rock, and also with the distance of the quantiles to the median (for the same depth interval). This observation essentially reveals that the current performance of the calibrated models in terms of reproducing the variance of observed $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ data is poor, and more generally that it is much more difficult to reproduce the variability than the central tendency of observed $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ data, when implementing the proposed workflow. Furthermore, the absence of many observed discrete quantiles of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ in the last depth intervals (mostly for d_{w} > 50 m), whatever the zone, re-emphasizes how difficult it actually is to get a detailed and complete picture of the statistical distribution of “observed” $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ from the $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates, more especially at depth, due to the limited and highly uneven reliability of the $\log T_{\mathrm{w}}$ estimates.

Figure 35b shows that simulated vertical profiles of well density, $\mathrm{wd}_{\mathrm{sim}}(d_{\mathrm{w}})$, accurately reproduce observed profiles of well density, $\mathrm{wd}_{\mathrm{obs}}(d_{\mathrm{w}})$, for both StLP and AppIntHZ zones (Figure 35.b1,b3), whereas the fit is somewhat weaker for the AppExtHZ zone (Figure 35.b2). In the StLP and AppExtHZ zones, wells are mostly concentrated at shallow depths in rock. Differently, in the AppIntHZ zone, wells are rather concentrated towards intermediate depths in rock. The related symmetric bell shape of this zone's $\mathrm{wd}_{\mathrm{obs}}(d_{\mathrm{w}})$ profile is actually surprising, yet it provides an interesting example of a practical case in which the complex interactions between the natural heterogeneities of fractured rock medium and the drillers' multi-criteria decision-making process behind well-drillers' sampling bias, appear to have led to drilling the open-hole wells preferentially to intermediate (~30–40 m) depths in rock, instead of shallow (~10–15 m) depths in rock as for the two other zones (StLP and AppExtHZ) of the study area.

Figure 35b thus shows that well density is far from being uniform with depth, whatever the zone. By further accounting for the fact that the calibrated models used the biased drilling mode, this finding clearly confirms that the actual wells have indeed been drilled following a biased sampling procedure, and hence that the regional database of the study area is indeed affected by a consequential well-drillers' sampling bias. Moreover, the fact that the $\mathrm{wd}_{\mathrm{obs}}(d_{\mathrm{w}})$ profiles are largely dissimilar between the three zones further reveals that well-drillers' sampling bias expresses itself in a very different manner depending on the arrangement of the structural and hydraulic heterogeneities throughout the fractured rock medium being sampled, or even on the hydrogeological context in general. Furthermore, it is found that the shallow depth intervals appear to be the hardest to accurately reproduce in terms of well density: the proportion of simulated wells in the first 2-m depth interval in rock, indeed, is barely half the percentage it should be, whatever the zone. This particular finding is interesting in that it hints that the specific manner the drillers' criterion C1 for minimum drill hole depth within the rock aquifer was translated into the $d_{\mathrm{w.min}}$ stochastic parameter may actually be underperforming, by preventing too many wells from ending at very shallow depths in rock.

Overall, Figures 35a and 35b confirm that the fit between the simulated and observed statistics is rather good overall, both in terms of central tendencies of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ and in terms of well densities. The extensive analysis of the sensitivity of the model outputs to each individual sub-parameter (summarized in Annexe A7.4) further confirms that the calibrated values finally obtained for the model sub-parameters (and for each zone) are all reasonably optimal. Accordingly, the quality of the fit thus achieved for each zone is considered sufficient for the purposes of this research, even though the variability of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ could not be satisfactorily reproduced.

Figure 35c compares the depth trend of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ obtained from biased sampling versus that obtained from unbiased sampling of the fractured-rock aquifer system within each zone. The biased $\log T_{\mathrm{w}}^{*}(d_{\mathrm{w}})$ trends are computed from the calibrated model results presented in Figure 35a, whereas the unbiased $\log T_{\mathrm{w}}^{*}(d_{\mathrm{w}})$ trends are rather computed from the different model results obtained after switching to the alternative unbiased drilling mode (Annexe A7.5). For the purposes of this specific comparative analysis, the measure of central tendency used is the median. Figure 35c essentially confirms the strong disparity between biased and unbiased $\log T_{\mathrm{w}}^{*}(d_{\mathrm{w}})$ trends which was conjectured in the problem conceptualization (Section 2.2). Indeed, depth-decreasing $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ trends are obtained for all three zones when the biased drilling mode is used, whereas absolutely depth-increasing $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ trends are obtained when an unbiased drilling mode is used instead. For the biased model results, the $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ medians decrease by about two orders of magnitude (similarly from -4 to -6) from the first to last depth interval. Conversely, for unbiased model results, the $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ medians start with a lowest value (about -6, -7, and -8, in order of zone) for the first depth interval and increase up to an apparent ceiling value (near -4.0, -4.5, and -5.0) for the last depth intervals (reached at a d_{w} around 40 m, 50 m, and 50 m). Moreover, comparison of the unbiased-sampling trends against the $\log T_{\mathrm{w.target}}^{**}(s_{\mathrm{w.a}})$ curves in Figure 35a further suggests that open-hole water wells having a satisfying productivity would have been "obtained" for >50 % of the drilling operations by simply requiring a minimum drill hole depth in rock ($d_{\mathrm{w.min}}$) equal to or greater than 20 m, 40 m, and 50 m, depending on the zone. This is an example of the insights that can be gained from examining the complementary results obtained simply through re-running the calibrated model in the alternative unbiased drilling mode (detailed model results under the unbiased drilling mode are in Annexe A7.5).

Figure 35d shows, first of all, that bulk hydraulic conductivity ($\log K_{\mathrm{b}}$) inferred from simulated fracture data is highly heterogeneous. The variability of $\log K_{\mathrm{b}}$, however, is profoundly depth-dependent: $\log K_{\mathrm{b}}$ values range from about -9.5 up to -2.0 or so, in the top 0–10 m depth interval, whereas they vary within a much narrower range in the last depth intervals. Indeed, the shape of the statistical distributions of $\log K_{\mathrm{b}}$ (computed by 10-m depth intervals) changes drastically with depth, and in a different way depending on the zone. For StLP and AppExtHZ zones, $\log K_{\mathrm{b}}$ shifts rapidly from a unimodal to a bimodal distribution, and then back again to a mostly unimodal distribution, with increasing depth in rock (z). Two sub-distributions are thus being combined: a lower sub-distribution largely controlled by the poor hydraulic conductivity of the rock matrix ($K_{\mathrm{b}} \approx K_{\mathrm{m}}$), and an upper sub-distribution chiefly characterized by the presence of permeable fractures ($K_{\mathrm{b}} \gg K_{\mathrm{m}}$). The given proportions of $\log K_{\mathrm{b}}$ < -8.0 within each depth interval provide an efficient

means to assess the relative weight of the rock-matrix controlled sub-distribution as a function of z. It is notably seen that K_b is predominantly controlled by K_m beyond a threshold z which is in fact zone-dependent: >40 m, >20 m, and >10 m (for the three zones ordered as in Figure 35, using 50 % as the threshold weight). It also appears that the part of fracture-controlled K_b at shallow depths in rock differs greatly between the three zones. In the 0–10 m depth interval, for instance, the proportion of fracture-controlled K_b is above 90 % for the StLP zone, around 80 % for the AppExtHZ zone, and only about 60 % for the AppIntHZ zone. That proportion decreases to about 10–15 % in the last (90–10 m) depth interval. Accordingly, $\log K_\mathrm{b}$, on average, decreases significantly with z. The depth-decreasing $\log K_\mathrm{b}(z)$ trend is in fact the result of the combined effects of the three reference terms involved in the stochastic parameters of the fractured-rock generation submodel: the depth-decreasing $\mathrm{fd}^*(z)$ and $b_\mathrm{f}^*(z_\mathrm{f})$ reference formulas, and the low K_m^* reference constant. Three alternative measures of central tendency are provided in Figure 35d to assess the $\log K_\mathrm{b}(z)$ trend from different perspectives. Vertical profiles of $\log K_\mathrm{b}(z)$ based on medians approach the lower rock-matrix controlled mode ($\rightarrow \log K_\mathrm{m}^*$) rapidly with increasing depth. Vertical profiles based on arithmetic means, on the contrary, track the upper end of each fracture-controlled sub-distribution of $\log K_\mathrm{b}$, far above the distribution modes. Vertical profiles based on geometric means (GM) appear to be a good compromise between these two extremes, especially in the perspective of regional-scale hydraulic characterization, since they capture the changing composition of K_b with depth in terms of the dominant controls —mostly by fractures at shallow depths vs. mostly by rock matrix deeper — while generally giving more importance to the fracture-controlled K_b subset, compared to the median-based profiles. This is interesting in that it provides a picture of the vertical spatial variability of K_b that is consistent with the widely accepted fact that regional groundwater flow occurs preferentially through the hydraulically-active fractures within a fractured-rock aquifer system (Singhal & Gupta, 2010), while still being constrained by the poor K_m, due to limited frequency, length, and thus interconnectivity, of the fractures at the regional scale. Nevertheless, as explained earlier (Section 2.4.d: the part about K_b), the GM is not a robust measure of the central tendency of K_b in such fractured rock medium, partly due to the bimodality of $\log K_\mathrm{b}$, and partly because the GM values are in fact dependent on the depth-interval width used ($= \Delta z_\mathrm{saKb}$) for their computation. Accordingly, the authors would recommend the use of the GM-based vertical profiles of $\log K_\mathrm{b}(z)$ only for the purposes of assessing the overall depth trend of K_b or, in other words, the regional-scale depth-dependent equivalent-average bulk K of the fractured-rock aquifer system: $\overline{\log K_\mathrm{b}}(z)$ (de Dreuzy *et al.*, 2002); otherwise, it would be more appropriate to exploit the quantile statistics on $\log K_\mathrm{b}$ computed per depth interval, for instance in

order to prepare a heterogeneous a priori $\log K_{\mathrm{b}}$ field for a 2D-vertical or 3D numerical groundwater flow model.

Moreover, in order to validate the plausibility of the statistics on $\log K_{\mathrm{b}}$ obtained for each zone of study area, the latter were compared with a few selected values reported in the literature for similar geological settings. For a fractured siltstone aquifer near Ithaca (New York, USA), slug test data showed K_{b} estimates ranging between 4×10^{-7} – 2×10^{-6} m/s at shallow depths in rock (<50m), and between 4×10^{-9} – 2×10^{-8} m/s deeper in rock (>80m) (Merin, 1992). These ranges are very close to the GM-based vertical profile of K_{b} simulated for the StLP zone. Other authors, using an original inverse approach based on groundwater-flow model calibration for inferring the regional depth-decreasing trend of $\log K_{\mathrm{b}}\,(z)$ for the fractured rock terrains (mostly siliciclastic: sandstones and shales) in a study area of ~24,000 km^2 in the Eastern USA, deduced that average K_{b} "decreases by several orders of magnitude within the top 100 m of land surface", from ~10^{-6} m/s at ~20 m, down to ~10^{-9} m/s at ~80 m below land surface (Sanford, 2017). These values, again, compare rather well with the GM-based vertical profile of K_{b} for the StLP zone.

Furthermore, Figure 35d displays the alternative $\log K_{\mathrm{b}}\,(z)$ trend model that would be obtained by following the conventional approach instead of the stochastic modeling workflow proposed in this paper. Comparison of the "conventional" depth trends (red curves) against the simulated GM-based depth trends (black curves) reveals that the conventional approach systematically overestimates K_{b} at all depths, by up to two orders of magnitude. The discrepancies are larger for the two Appalachians zones, and more especially in the shallow depth intervals. In addition to these large errors in terms of calculated trend, it was further found that the conventional approach is unable to capture the bimodality of $\log K_{\mathrm{b}}$ —it produces unimodal quasi lognormal distributions of $\log K_{\mathrm{b}}$ for all depth intervals. In short, Figure 35d provides evidence that the conventional approach produces misleading statistics, as was stated earlier (Sections 1 and 2.1).

Globally, Figure 35 shows that model sub-parameters having different optimal values between zones (fd_0, λ_{fd}, b_{f0}, $\Delta z^*_{\mathrm{dh.min}}$ and its σ; see the zone-dependent values in Table 17) have a major impact on the spatial structure of the model results. Interpretation of Figure 35 from this perspective leads to the following observations: i) a decrease of fd_0 or of b_{f0} results in deeper and lower-T^*_{w} wells, on average, and in a significant shift of the distributions of $\log K_{\mathrm{b}}$ towards the lower K^*_{m}-controlled mode; ii) a decrease of λ_{fd} additionally results in a sensible reduction in the rate of decrease of $\log K_{\mathrm{b}}$ with z; iii) an increase of $\Delta z^*_{\mathrm{dh.min}}$ and of its related parameter σ results

respectively in a shift of the modal well depth towards higher d_{w} values, and in an increased dispersion of the d_{w} data along the d axis. Overall, these strategically selected model sub-parameters clearly exert an important influence of the stochastic simulation. A thorough sensitivity analysis provided in Annexe A7.4 gives a more complete picture of the relative importance of every sub-parameter of the stochastic model.

4.3.2 Parametric study: Testing combinations of the main four Boolean parameters of the stochastic model

A parametric study focusing on the Boolean parameters (BP's) of the stochastic model was carried out in order to assess the respective role of several key components of the model, notably in terms of their impact on the spatial structure of model results. Four BP's were selected —following preliminary tests— for the purposes of this parametric study: DM, $b_{\mathrm{f}}.\mathrm{hetero}$, $\mathrm{fd}.\mathrm{zdep}$, and $b_{\mathrm{f}}.\mathrm{zdep}$. The definitions for the BP's were given earlier in Table 16.C. A list of all possible combinations of these four BP's was then prepared, resulting in the 16 different model scenarios defined in Table 18, each identified by a unique "combination index" (CI) between 1 and 16.

Table 18: Tested combinations (model scenarios) of the four selected Boolean parameters (BP's) of the stochastic model, all based on the optimized parameterization for the St. Lawrence Platform zone of the study area. The symbol ✓ signifies that the BP is enabled for the model run with that combination. The last of the tested combinations (CI = 16) corresponds to the calibrated model (for the StLP zone) unchanged, whereas the other combinations (CI = 1–15) explore various alternative model setups in terms of BP's being enabled or disabled. The Boolean parameters are more fully defined in Table 16.C of Section 3.2.2.

	Combination index (CI)															
Boolean parameter (BP)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
DM: biased drilling mode (i.e. drilling at non-random depths)	–	–	–	–	–	–	–	–	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
$b_{\mathrm{f}}.\mathrm{hetero}$: fully heterogeneous fracture apertures (/fr. & /well)	–	–	–	–	✓	✓	✓	✓	–	–	–	–	✓	✓	✓	✓
$\mathrm{fd}.\mathrm{zdep}$: depth-decreasing ref. trend for fracture density	–	–	✓	✓	–	–	✓	✓	–	–	✓	✓	–	–	✓	✓
$b_{\mathrm{f}}.\mathrm{zdep}$: depth-decreasing ref. trend for fracture aperture	–	✓	–	✓	–	✓	–	✓	–	✓	–	✓	–	✓	–	✓

The calibrated model for the St. Lawrence Platform (StLP) zone, originally with all of its BP's enabled, was chosen to define the reference model scenario (i.e. CI = 16) for this exercise. The general principle of the parametric study was thus to run multiple instances of the stochastic model with its BP's altered according to the different model scenarios from Table 18.

As a first step, three groups of 16 graphs were produced to condense the results from the numerous model runs in terms of an average simulated vertical profile of well transmissivity, $\log T_{\mathrm{w}}^{*}\,(d_{\mathrm{w}})$; of well density, $\mathrm{wd}_{\mathrm{sim}}(d_{\mathrm{w}})$; and of bulk-rock hydraulic conductivity, $\log K_{\mathrm{b}}\,(z)$; for each of the 16 tested scenarios from Table 18. Ten instances of the stochastic model, originally calibrated for the StLP zone as above, were run in parallel for each of the 16 scenarios —hence 10 × 16 = 160 model runs in total— in order to get a sense of the variability around the computed averages. The produced graphs are thus compared in order to assess the impact of the 15 alternative scenarios (CI = 1–15) against the reference model scenario (CI = 16) in terms of noticeable changes in the simulated vertical profiles of T_{w}^{*}, wd, and K_{b}. However, only the graphs of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}\,(d_{\mathrm{w}})$ are presented in this section, while all three groups of graphs are provided in Annexe A7.6. Nevertheless, the following interpretation considers all three groups of graphs.

Graphs of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}\,(d_{\mathrm{w}})$ show depth-increasing $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ trends for most scenarios (CI = 1–12); indeed, only the last four scenarios (CI = 13–16) produce clear depth-decreasing $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ trends (Figure 36). These graph confirm, first, that drilling at non-random depths in the rock aquifer (that is, "biased drilling") is the primary condition for obtaining a depth-decreasing trend of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$. However, they also highlight that biased drilling is not a sufficient condition, as it must in fact be combined with a large heterogeneity of fracture properties (f. apertures → f. transmissivities), in order to actually achieve a depth-decreasing $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ profile (Figure 36: CI = 13–16 graphs only).

Graphs of $\mathrm{wd}_{\mathrm{sim}}(d_{\mathrm{w}})$ substantiate how different the vertical profiles of well density are depending on the drilling mode used (see Figure 2 of Annexe A7.6). Indeed, well depths tend to concentrate at shallow depths in rock whenever the drillers' multi-criteria decision-making process regarding the final depth for the open-hole wells is fully considered (that is, in biased drilling mode). In contrast, well depths distribute evenly along the depth axis when the unbiased drilling mode is chosen, that is, when drilling the open-hole wells to purely-random depths in the rock aquifer. The smaller differences noted between the profiles of well density for CI = 9–15 and the reference profile (CI = 16) simply indicate that the other three Boolean parameters ($b_{\mathrm{f}}.\mathrm{hetero}$, $\mathrm{fd}.\mathrm{zdep}$, and $b_{\mathrm{f}}.\mathrm{zdep}$), while not as important as the first one (DM: drilling mode), must also be enabled in order to best reproduce the observed vertical distribution of well depths.

Graphs of $\log K_{\mathrm{b}}(z)$ first serve to remind that the actual hydraulic properties of the rock aquifer are totally independent of the drilling mode used (see Figure 3 of Annexe A7.6). Indeed, graphs obtained with unbiased (CI = 1–8) vs. biased (CI = 9–16) drilling show absolutely no difference (aside from a very slight variability due to the stochastic nature of the simulation). Although this is an expected and rather obvious finding, it remains relevant and interesting to underscore it with visual evidence. Moreover, these graphs reveal the strong differences between the profiles of $\log K_{\mathrm{b}}(z)$ depending on which of the three fractured-rock related Boolean parameters ($b_{\mathrm{f}}.\mathrm{hetero}$, $\mathrm{fd}.\mathrm{zdep}$, and $b_{\mathrm{f}}.\mathrm{zdep}$) are enabled. Notably, they show that heterogeneity of bulk-rock hydraulic conductivity (K_{b}) originates primarily from that of the fracture apertures ($b_{\mathrm{f}}.\mathrm{hetero}$ = ✓), and that it is significantly enhanced if the density of fractures decreases rapidly with depth ($\mathrm{fd}.\mathrm{zdep}$ = ✓). Furthermore, the fact that the arithmetic means of K_{b} depart significantly from the geometric means of K_{b} stresses that the former ones are in fact largely controlled by the most transmissive fractures within each depth interval. This departure between arithmetic- and geometric-mean K_{b} is thus an additional indicator of how heterogeneous the fractured-rock medium actually is.

Overall, these three groups of graphs (Figure 36, then Figures 2 and 3 of Annexe A7.6) thus confirm the relevance and importance of all main components of the stochastic model, notably including the biased drilling submodel (as a whole) and the several parameters that control depth dependence and variability of fracture apertures densities within the fractured-rock generation submodel (see Table 16.A).

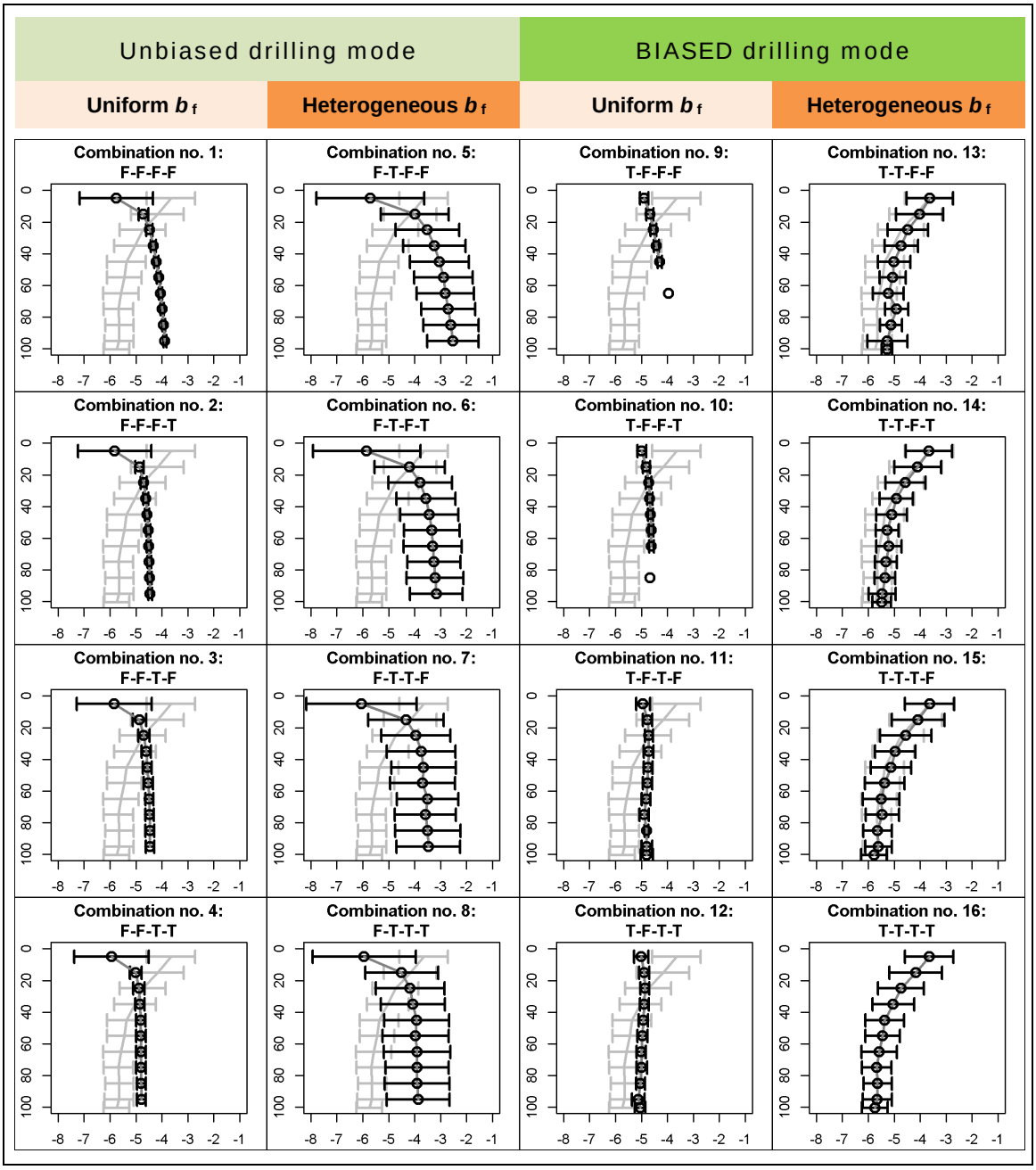


Figure 36: Vertical profiles of well transmissivity simulated for each of the 16 tested scenarios from Table 18. These profiles of $\log T_w^*(d_w)$ consist of geometric averages (black circles) and standard deviations (whiskers) of T_w^* computed for each depth interval of 10 m. The combination indices (CI) and sets of Boolean (True/False) values given in the title of each graph relate to the 16 different model scenarios. The last scenario (CI = 16) is used as reference, and thus is replicated in the other graphs (CI = 1–15), in light gray, to facilitate visual comparison of the profiles against the reference one (CI = 16), that results from runs of the stochastic model calibrated for the St. Lawrence Platform zone and unchanged (i.e. with all four of its Boolean parameters enabled). Note that a depth-decreasing reference trend for fracture density ($\mathrm{fd.zdep}$ = ✓) is involved in scenarios of 3rd and 4th rows only, while a depth-decreasing reference trend for fracture aperture ($b_f.\mathrm{zdep}$ = ✓) is involved in scenarios of 2rd and 4th rows only. These can easily be identified by reading the third and fourth T/F values reported in the graph titles, respectively.

Then, several quantitative indicators were defined so as to extract the characteristic features from the simulated data and thus concisely summarize the results of this parametric study. The indicators that are employed in Figure 37 below, which notably aim to assess the fit between simulated results and observed data, are divided into three groups:

a) [top graph] Two complementary indicators assessing the average error between simulated and observed quantiles of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ that are deemed quantitatively reliable. The first, 'meAllQT', is the average of the mean errors (ME) computed for each depth interval of 10 m, while the second, 'maeAllQT', is the average of the mean absolute errors (MAE) computed for each depth interval of 10 m.

b) [middle graph] Two pairs of indicators assessing the average slope of the median-based simulated $\log T_{\mathrm{w}}^{*}\,(d_{\mathrm{w}})$ trend for two different depth ranges. First pair, 'slopelogTw', is the slope for the 0–50 m depth range, while second pair, '… (top 2 intervals)', is the slope for the shallower 0–20 m depth range. The 'sim' and 'obs' suffixes are used for distinguishing between indicators calculated from simulated versus from observed data.

c) [lower graph] Two pairs of indicators assessing two specific percentiles of the simulated or observed d_{w} data. These pairs are 'dwP50' and 'dwP90', respectively assessing the 50$^{\mathrm{th}}$ and 90$^{\mathrm{th}}$ percentiles of d_{w}, again using the same 'sim' and 'obs' suffixes.

   (These indicators, as well as many other, are defined in greater detail in Annexe A7.4.) (Note also that several additional indicator-based results are provided in Annexe A7.6.)

As explained above, ten repetitions of the stochastic model were run with the BP settings from each different scenario, in order to assess both the average value and the variability of all indicators. The results thus obtained for the indicators are summarized in Figure 37.

Figure 37, first taken as a whole, confirms that the BP's indeed have an important impact on simulated results, and that most of the tested scenarios (i.e. combinations of BP's) do not allow a good fit between simulated results and observed data.

Turning to a more detailed analysis of results, Figure 37a shows that only the last four scenarios (CI = 13–16) result in very low MAE's (i.e. a good fit) in terms of quantiles of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$. Scenarios with the worse performances in terms of MAE appear to be when a stochastic definition is used for the fracture apertures and the drilling mode is "unbiased" ($b_{\mathrm{f}}.\mathrm{hetero}$ = ✓ & DM = '–') (CI = 5–8). Figure 37a nonetheless indicates that a few scenarios, outside from the last four scenarios, also show

ME's that are close to zero (CI = 7–9), showing that these series of simulations were at least able to produce distributions of $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ that are neither overestimating nor underestimating the distribution of observed $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ on average.

Figure 37b, similarly, shows that only the last four scenarios (CI = 13–16) are able to produce a depth-decreasing $\log T_{\mathrm{w}}^{*}\left(d_{\mathrm{w}}\right)$ trend and hence to reproduce the negative slope of the observed $\log T_{\mathrm{w}}^{*}\left(d_{\mathrm{w}}\right)$ trend. Indeed, the previous four scenarios (CI = 9–12) produce an almost neutral slope, while other scenarios (CI = 1–8) produce a clearly positive slope, i.e. a depth-increasing $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ trend that is the opposite of the observed slope. The scenarios with the most positive slopes correspond with the least performing scenarios from Figure 37a (i.e. CI = 5–8).

Figure 37c first reveals that percentiles of d_{w} are primarily controlled by the drilling mode. Indeed, the value obtained for each of the two assessed percentiles of d_{w} is about the same for the eight first scenarios (CI = 1–8): 50$^{\text{th}}$ ≈ 50 m; 90$^{\text{th}}$ ≈ 90 m. This is in accordance with the definition of the unbiased drilling mode as the mode in which the drilling depths are decided in a purely random way prior to drilling, and are thus uniformly distributed within the considered depth range (conveniently extending from 0 m to $Z_{\max}$ = 100 m in this study). The left half of Figure 37c (CI = 1–8) further highlights that drilling depths (i.e. simulated d_{w} data) in the unbiased drilling mode are completely independent of the characteristics of the simulated fractured rock medium. By contrast, the right half of Figure 37c shows that the biased drilling mode significantly improves the fit between simulated and observed percentiles of d_{w}. For instance, the scenario in which all BP's are enabled except $b_{\mathrm{f}}.\mathrm{hetero}$ (CI = 12) appears able to reproduce the 90$^{\text{th}}$ percentile of d_{w} very well, but not the 50$^{\text{th}}$. Actually, only the last scenario (CI = 16) is able to accurately reproduce both the 50$^{\text{th}}$ and 90$^{\text{th}}$ percentiles of d_{w}.

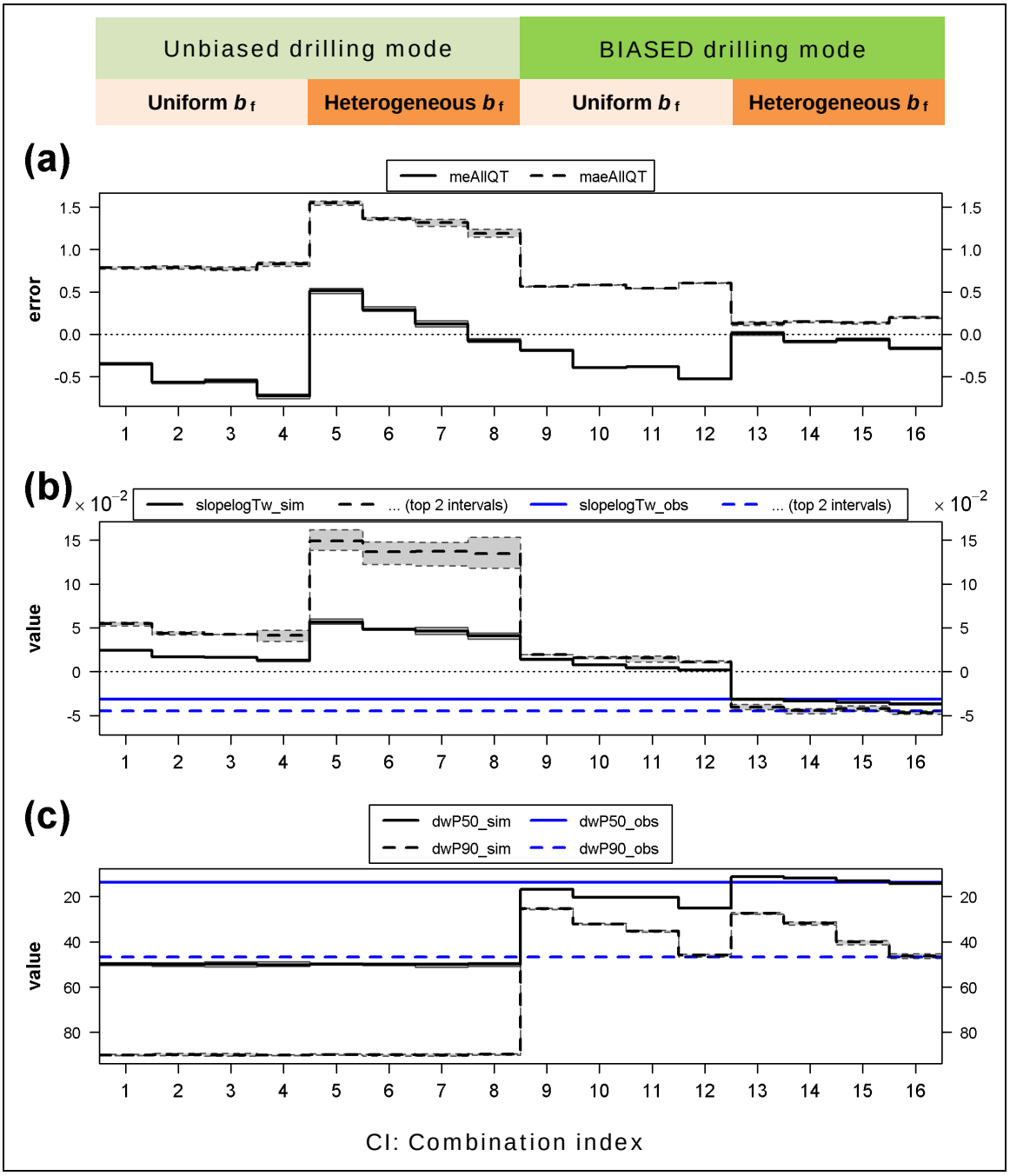


Figure 37: Overview of the results of the parametric study of the main four Boolean parameters of the stochastic model, here in the form of three groups of indicators (a – c) measuring either the goodness of fit between the simulated and the observed data, or other statistical properties which can be compared. Precise definitions for the indicators are given in the main text (look for the three paragraphs numbered from 'a' to 'c') as well as in Annexe A7.4. The "combination index" (CI) values along the X axis refer to the 16 different model scenarios defined in Table 18. The reference scenario (CI = 16) corresponds to the stochastic model calibrated for the St. Lawrence Platform zone with all four of its Boolean parameters enabled (i.e. unchanged). Accordingly, the observed data considered in this analysis pertain to the St. Lawrence Platform zone of the study area.

In sum, Figures 36 and 37 together essentially demonstrate that: i) biased drilling (DM = ✓) and heterogeneous fracture apertures ($b_{\mathrm{f}}.\mathrm{hetero}$ = ✓) are both needed to obtain a markedly depth-decreasing $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ trend as observed in the study area (and presumably in most fractured rock aquifers) and thus show that biased drilling depths are also an indication of actual fracture heterogeneity; ii) the "observed" distribution of well depths is clearly biased in the study area, since the biased drilling mode must be used (DM = ✓) to get a simulated profile of $\mathrm{wd}_{\mathrm{sim}}(d_{\mathrm{w}})$ that resembles the observed profile; iii) considering the depth-dependence of fracture density ($\mathrm{fd}.\mathrm{zdep}$ = ✓) and of fracture aperture ($b_{\mathrm{f}}.\mathrm{zdep}$ = ✓) in addition to the other two BP's is necessary to achieve the best possible calibration of the stochastic model, especially regarding the vertical profiles of well density, thus providing an empirical evidence that these fracture properties actually do change with depth in the study area.

Furthermore, the results of this parametric study reveal that it is primarily the large heterogeneity of fracture apertures (b_{f}) —and not the depth-dependence of b_{f} nor that of fd— which makes it possible to simulate a depth-decreasing $\log T_{\mathrm{w}}^{*}(d_{\mathrm{w}})$ trend that is the first characteristic symptom of the well-drillers' sampling bias. This stems from the fact that the heterogeneity of b_{f} increases the probability of encountering very transmissive fractures (since high b_{f} means high T_{f}) during drilling, notably at shallow depths in rock, in which cases the total transmissivity of the drill hole (T_{dh}^{*}) reaches a satisfying level of productivity soon, giving the well drillers opportunities to stop drilling at shallow depths in rock.

More generally, these results confirm that the four BP's investigated throughout this parametric study (DM, $b_{\mathrm{f}}.\mathrm{hetero}$, $\mathrm{fd}.\mathrm{zdep}$, and $b_{\mathrm{f}}.\mathrm{zdep}$) indeed control key components of the stochastic model, which are all required to achieve a good calibration of the model against observed data.

On another note, results from a parametric study of a different type, which was carried out to assess the sensitivity of all numeric (non-Boolean) sub-parameters of the stochastic model, may also be consulted to better understand the respective role and importance of nearly all numeric (i.e. non-Boolean) sub-parameters of the stochastic model (Annexe A7.4 for the results of this other parametric study, and Table 17 of this chapter to see a list of all model sub-parameters).

4.3.3 Sorting effect of well-drillers' sampling bias

This section presents the results of additional stochastic simulations that were carried out in order to get a better idea of the nature of a biased sample of a fractured rock medium, in the prospect of discovering further symptoms that are characteristic of the biased drilling mode. Two instances

of the stochastic model calibrated for St. Lawrence Platform (StLP) zone were run for this purpose, one in the biased drilling mode (DM = ✓), and another in the unbiased drilling mode (DM = '–'). A few changes were applied to the global parameters of the model (for both runs) in order to get clearer results: the number of wells to simulate was greatly increased (n_w = 250,000), and the inter-well heterogeneity terms for fracture density (fd) and fracture apertures (b_f) were both neutralized (i.e. both $\mathrm{fd.iw.hetero}$ and $b_\mathrm{f}.\mathrm{iw.hetero}$ Boolean parameters were disabled). The model outputs, more specifically the simulated fracture depth (z_f) and fracture transmissivity (T_f) data, were then processed in a specific way. First, a special two-dimensional coordinate system was set up, with well depth in rock (d_w) as the X dimension, and depth in rock (z) as the Y dimension. The domain of each dimension was then divided into 10 intervals of a regular width of 10.0 m, since the 1D-z simulation domain used was 0.0 m < z < Z_max = 100.0 m, and an extra half-unbounded interval was added for the X dimension to deal with the few unsatisfying wells drilled even deeper (i.e. $d_\mathrm{w} > Z_\mathrm{max}$). Then, 110 classes of $d_\mathrm{w}|z$ were defined from all possible combinations of the 11 intervals of d_w and the 10 intervals of z. This two-dimensional classification scheme was considered throughout the rest of the data processing. Two averages were computed from the simulated fracture data, for each of the $d_\mathrm{w}|z$ classes (and each model run): the average fracture density ($\langle\mathrm{fd}\rangle$), and the average bulk-rock hydraulic conductivity ($\langle K_\mathrm{b}\rangle$). The arithmetic mean was chosen as the measure of central tendency for both averages. Class-wise computations were based on the following two pairs of equations:

$$n_\mathrm{f.raw}^{\mathrm{ci},i} = \sum_{k=1}^{n_\mathrm{f}^{\mathrm{ci},i}} 1 \equiv n_\mathrm{f}^{\mathrm{ci},i} \tag{30a}$$

$$\langle\mathrm{fd}\rangle^\mathrm{ci} = \left[\left(\sum_i n_\mathrm{f.raw}^{\mathrm{ci},i}\right) \Big/ n_\mathrm{w}^\mathrm{ci}\right] \Big/ \Delta z_\mathrm{fdKb} \tag{30b}$$

$$T_\mathrm{raw}^{\mathrm{ci},i} = \left[\left(\sum_{k=1}^{n_\mathrm{f}^{\mathrm{ci},i}} T_\mathrm{f}^{\mathrm{ci},i,k}\right) + K_\mathrm{m}^i \Delta z_\mathrm{fdKb}\right] \tag{31a}$$

$$\langle K_\mathrm{b}\rangle^\mathrm{ci} = \left[\left(\sum_i T_\mathrm{raw}^{\mathrm{ci},i}\right) \Big/ n_\mathrm{w}^\mathrm{ci}\right] \Big/ \Delta z_\mathrm{fdKb} \tag{31b}$$

where ci is the class index (an integer value between 1 and 110; for instance, ci = 11 corresponds to the pair of condition that $d_\mathrm{w} \in [10, 20[$ m while $z_{(\mathrm{f})} \in [0, 10[$ m); i is a "wise" well location index (wise because i goes only through the wells matching the conditions for the current ci^th class); k is a wise individual fracture index (k goes only through the fractures of a specific well location that

further match the conditions for the current $\mathrm{ci}^{\mathrm{th}}$ class); n_{f} is the counted number of fractures (matching several conditions); n_{w} is the counted number of wells (matching the conditions for the current $\mathrm{ci}^{\mathrm{th}}$ class); Δz_{fdKb} is the interval-width parameter introduced above for dividing d_{w} and z into regular intervals (Δz_{fdKb} = 10.0 m); K_{m} is the K of the rock matrix (well-location specific); and $n_{\mathrm{f.raw}}$ and T_{raw} are intermediate variables (included for the sake of clarity). Once both $\langle \mathrm{fd} \rangle^{\mathrm{ci}}$ and $\langle K_{\mathrm{b}} \rangle^{\mathrm{ci}}$ were computed for every $d_{\mathrm{w}}|z$ class (i.e. for ci from 1 up to 110) and for both biased and unbiased drilling modes, the $\langle \mathrm{fd} \rangle$ and $\langle K_{\mathrm{b}} \rangle$ data obtained were finally graphed for presentation and interpretation.

Figures 38 and 39 present the processed results of these two special stochastic model runs, respectively in terms of $\langle \mathrm{fd} \rangle$ and $\langle K_{\mathrm{b}} \rangle$. Results about averages are first presented in the form of 2D color graphs, i.e. as a function of both the intervals of d_{w} and the intervals of z (Figures 38a and 39a). Yet, in order to facilitate visual interpretation of the results, two additional series of graphs are provided: graphs plotting the variation of either average as a function of z for selected intervals of d_{w} (Figures 38b and 39b), and graphs plotting the variation of either average as a function of d_{w} for selected intervals of z (Figures 38c and 39c). In other terms, these two additional series of graphs (b and c) correspond respectively to column-wise (vertical) and row-wise (horizontal) extractions of the data matrix from the first series of graphs (a).The reference trend curves drawn in the two additional series of graphs (b and c) were calculated using the following formulas:

$$\langle \mathrm{fd} \rangle^{*}(z) = \mathrm{fd}^{*}(z) \tag{32}$$

$$\langle K_{\mathrm{b}} \rangle^{*}(z) \approx \mathrm{fd}^{*}(z) \cdot T_{\mathrm{f}}\left(b_{\mathrm{f}}^{*}(z)\right) \cdot \mathrm{E}\left[{H_{\mathrm{bf.f}}}^{3}\right] + K_{\mathrm{m}}^{*} \cdot \mathrm{E}[H_{\mathrm{Km}}] \tag{33}$$

where $\mathrm{fd}^{*}(z)$, $b_{\mathrm{f}}^{*}(z)$, and K_{m}^{*} are reference terms previously defined in Table 16, $T_{\mathrm{f}}(b_{\mathrm{f}})$ is the cubic-law formula previously defined by Equation 27, $\mathrm{E}\left[{H_{\mathrm{bf.f}}}^{3}\right]$ is the expectation for the $H_{\mathrm{bf.f}}$ random variable cubed (which is about 37.2 with the current settings of the calibrated model being used), and $\mathrm{E}[H_{\mathrm{Km}}]$ is the expectation for the H_{Km} random variable (which is about 1.08).

First, Figures 38 and 39 clearly highlight that biased sampling of the fractured-rock aquifer medium —simulated by the biased drilling mode— results in a sample of simulated fracture showing a strong overall decreasing tendency in both the $\langle \mathrm{fd} \rangle$ and the $\log \langle K_{\mathrm{b}} \rangle$ as a function of well depth in rock (d_{w}), whereas unbiased sampling rather results in a sample of fracture results showing no increasing nor decreasing trend in the $\langle \mathrm{fd} \rangle$ and the $\log \langle K_{\mathrm{b}} \rangle$ with respect to d_{w} (for a given value or interval of z). Actually, three areas with distinct patterns of variability are identified from a visual

examination of the 2D color graphs for the biased case. These distinct areas are nevertheless more clearly identifiable in the $\log\langle K_\mathrm{b}\rangle\,(d_\mathrm{w}, z)$ graph (Figure 39.a1). In the upper-right triangular area of this latter graph —i.e. for colored squares above the diagonal line, which meet the condition $z < d_\mathrm{w}$— the two averages decrease considerably with d_w (i.e. along the X axis). Conversely, neither of the two averages decreases with d_w in the opposite lower-left triangular area (i.e. for $z > d_\mathrm{w}$). In between lies a narrow transition area following the diagonal line (i.e. for $z \approx d_\mathrm{w}$), in which the two averages decrease with d_w while having values remarkably higher than in those from the upper-right triangular area, for a given value of d_w. The three patterns thus defined are even more obvious in the additional graphs (mainly in Figure 38.c1 for $\langle\mathrm{fd}\rangle$, and in either Figure 39.b1 or Figure 39.c1 for $\langle K_\mathrm{b}\rangle$). Especially, Figure 39.b1 reveals that the $\log\langle K_\mathrm{b}\rangle$ values are much lower than the reference trend and further decrease considerably with both z and d_w, in the "drilled range" (i.e. $z < d_\mathrm{w}$); then, they suddenly reach values far above the reference trend, near the "well depth narrow range" (i.e. $z \approx d_\mathrm{w}$); and then beyond, they closely follow the reference trend, in the "undrilled range" (i.e. $z > d_\mathrm{w}$). Thus, the sorting (biasing) effect of the biased sampling strategy is actually limited to the drilled range including the end-depth interval (i.e. $z \leq d_\mathrm{w}$). Moreover, the peak values of $\langle K_\mathrm{b}\rangle$ noticed in the well depth narrow range ($z \approx d_\mathrm{w}$) provide evidence that it is most often the relatively higher K_b of the "last" depth interval —arising from higher density and larger transmissivity of fractures within— which leads to the stopping of the drilling within that depth interval in rock. The underlying rationale is that the higher K_b of the "last" depth interval, by causing a significant increase in the drill hole bulk transmissivity (T^*_dh) assessed by the well driller throughout the drilling operation, makes the T^*_dh suddenly reach a satisfying level of productivity, and thus leads to the decision by the well driller to stop drilling at this point, on the basis of criterion C2 requiring that $T^*_\mathrm{dh} \geq T^*_\mathrm{w.target}$. This rationale further means that the decreasing trend of $\log T^*_\mathrm{w}\,(d_\mathrm{w})$ and the sorting effect of well-drillers' sampling bias are intrinsically linked.

Conversely, the unbiased drilling mode did not cause any sorting effect on the averages, as was expected: the averages indeed systematically follow the calculated reference trends, with only a small variability due to the stochastic nature of the simulation (see graphs from the right column of both Figure 38 and Figure 39).

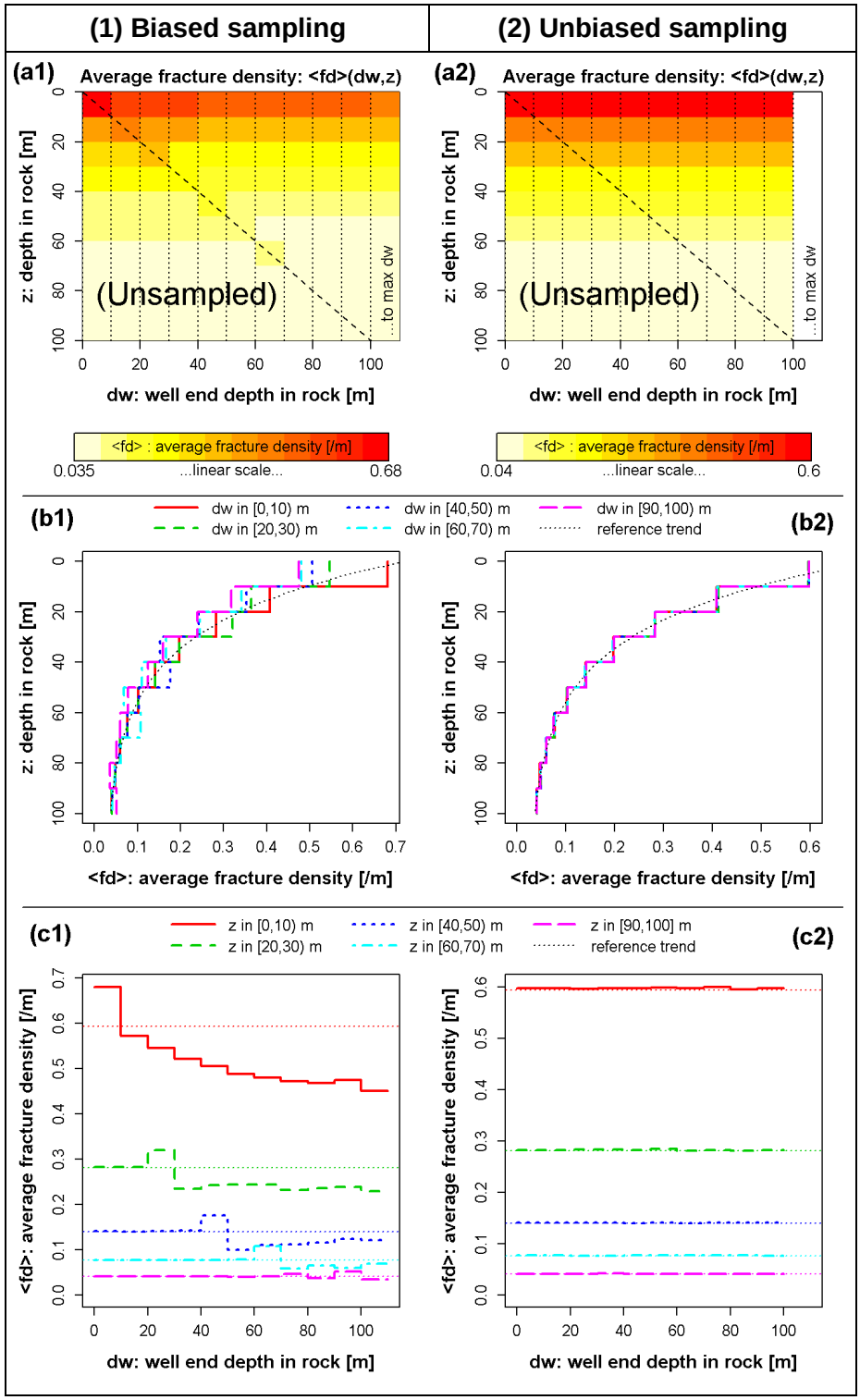


Figure 38: Arrangement of average fracture density, $\langle \mathrm{fd} \rangle$, with respect to both depth in rock (z) and well depth in rock (d_w), as obtained through special processing of the output data from runs of the stochastic model calibrated for the St. Lawrence Platform zone, with a very large number of simulated wells, using either the biased (1st column) or the unbiased (2nd column) drilling mode. (a) Variation of $\langle \mathrm{fd} \rangle$ as a function of both d_w and z, after division of both axes into regular intervals. Each 2D color graph is prepared based on a specific color scale. The diagonal dashed gray line

illustrates the equality $z = d_w$, that is, the precise depths in rock at which the wells are ending. (b) Variation of $\langle fd \rangle$ as a function of z for selected intervals of d_w. The colored curves present the corresponding vertical profiles of $\langle fd \rangle(z)$, for the d_w intervals listed in the legend above each graph. The dotted black curve illustrates the computed $\langle fd \rangle^*(z)$ reference trend. (c) Variation of $\langle fd \rangle$ as a function of d_w for selected intervals of z. The colored solid curves present the corresponding profiles of $\langle fd \rangle(d_w)$ obtained from horizontal extraction of the data from the 2D color graphs at the z intervals listed in the legend above each graph. The colored dotted horizontal lines show the computed $\langle fd \rangle^*(z)$ reference trend for each of the selected intervals of z.

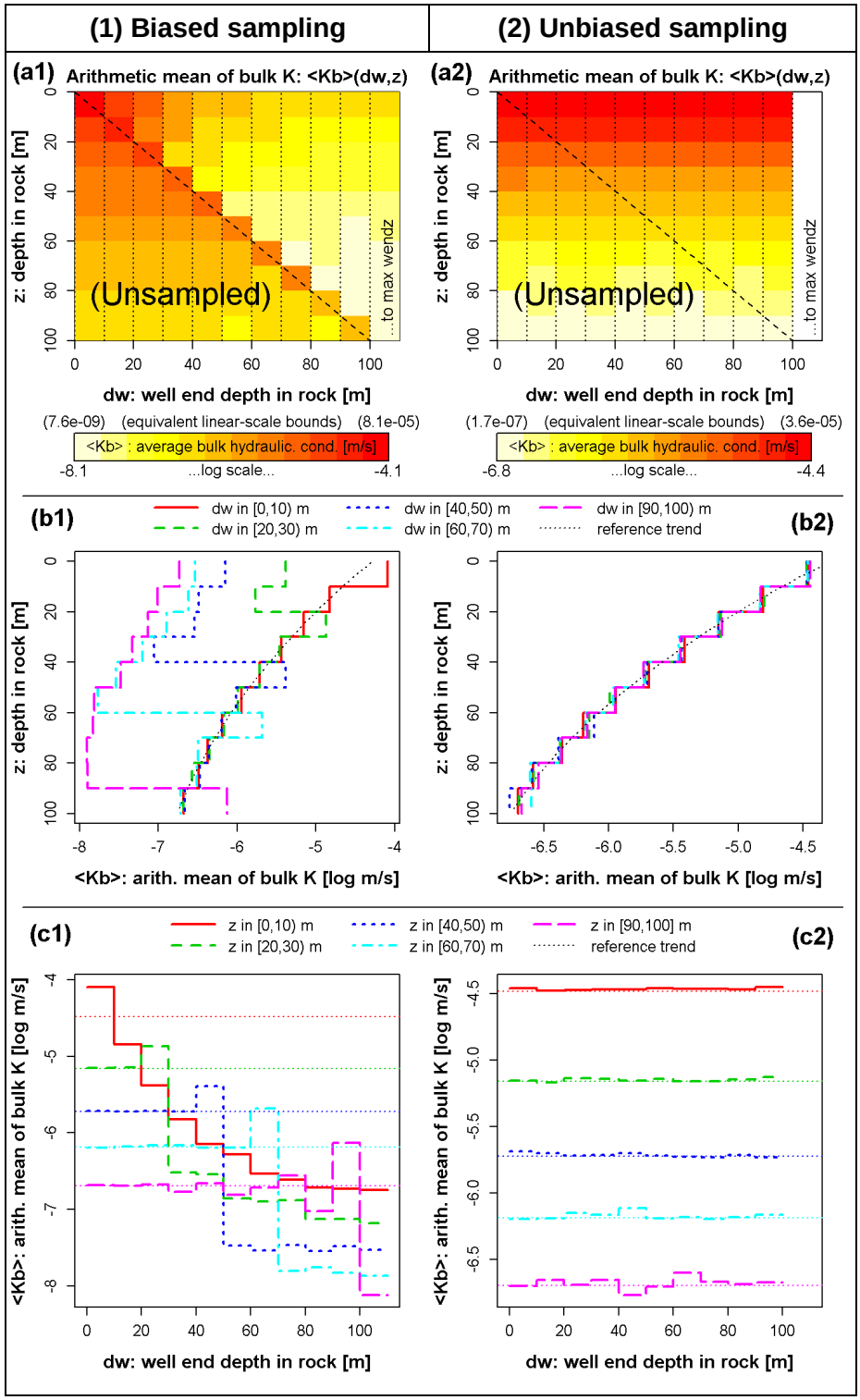


Figure 39: Arrangement of average bulk-rock hydraulic conductivity, $\langle K_b \rangle$, with respect to both depth in rock (z) and well depth in rock (d_w), as obtained through special processing of the output data from runs of the stochastic model calibrated for the St. Lawrence Platform zone, with a very large number of simulated wells, using either the biased (1st column) or the unbiased (2nd column) drilling mode. (a) Variation of $\langle K_b \rangle$ as a function of both d_w and z, after division of both axes into regular intervals. Each 2D color graph is prepared based on a specific color scale. The diagonal dashed

gray line illustrates the equality $z = d_w$, that is, the precise depths in rock at which the wells are ending. (b) Variation of $\langle K_b \rangle$ as a function of z for selected intervals of d_w. The colored curves present the corresponding vertical profiles of $\langle K_b \rangle(z)$, for the d_w intervals listed in the legend above each graph. The dotted black curve illustrates the computed $\langle K_b \rangle^*(z)$ reference trend. (c) Variation of $\langle K_b \rangle$ as a function of d_w for selected intervals of z. The colored solid curves present the corresponding profiles of $\langle K_b \rangle(d_w)$ obtained from horizontal extraction of the data from the 2D color graphs at the z intervals listed in the legend above each graph. The colored dotted horizontal lines illustrate the computed $\langle K_b \rangle^*(z)$ reference trend for each of the selected intervals of z.

Overall, results of this Section 4.3.3 demonstrate that the biased drilling mode (i.e. the well-drillers' sampling bias) leads to a strong sorting effect among the sample of 1D-z fractured-rock aquifer columns as a function of well depth in rock (d_w). The sorting effect, however, is restricted to the full drilled range ($z \leq d_w$). Results also highlight that the biased drilling mode has no influence on the sampling of the deeper parts of the 1D-z fractured-rock aquifer columns beyond the drilled range ($z > d_w$), which appears as if unbiased. Results thus reveal the characteristic vertical profiles of $\langle \mathrm{fd} \rangle$ and $\langle K_b \rangle$ that have led to the cessation of drilling within a given depth interval in rock (Figure 28 in Section 2.3). Moreover, this exercise confirms that the unbiased drilling mode of the stochastic model really succeeds in simulating an unbiased sampling of the virtual fractured rock medium. This exercise thus provides a clear picture of what a biased sample of a fractured-rock aquifer system actually looks like, and further highlights the "sorting effect" as another characteristic symptom of the well-drillers' sampling bias.

4.4 Applicability and limitations

Practical implementation of the stochastic modeling workflow described in this paper to infer regionally representative vertical profiles and detailed statistics of bulk-rock hydraulic conductivity (K_b) for a fractured-rock aquifer system essentially requires the availability of a large number of specific-capacity test (SC) data within the study region. These input requirements can easily be met in most regions, since SC data from well drillers are commonly collected and compiled in regional databases generally managed by the government or some public partner. Besides SC data, additional input information can of course help further constrain the optimal parameterization of the stochastic model, but it is not indispensable. Actually, this flexibility of the workflow is attributable to the fact that the developed methodology is based on an inverse modeling approach that includes an important stage of model calibration which provides calibrated values for every model sub-parameter, including those that were a priori unknown or hard to estimate. The key role of the model calibration process in the assessment of plausible values for many sub-parameters of the model is thus, in the end, more of a strength than a limitation of the developed methodology.

Accordingly, the operational stochastic modeling framework described in this paper should be appropriate and effective for a hydraulic characterization of most fractured-rock aquifer systems at the regional scale, as long as the following conditions are met:

- the private water wells drilled in the rock aquifer system are mostly open boreholes;
- SC data from well-performance tests conducted in private water wells drilled in the rock aquifer system are available in abundance (thousands) for the region of interest;
- groundwater flow throughout the rock aquifer system is largely controlled by fractures;
- the productivity of the rock aquifer system is, on average, low enough so that most private water wells have to be drilled deeper than just a few meters in rock in order to meet the productivity targets fixed by the well drillers along with their clients (i.e. criterion C2);
- the assumptions made within the problem conceptualization (Section 2) are on the whole reasonable and readily applicable to the rock aquifer system being investigated.

In turn, the stochastic modeling workflow described in this paper is probably not appropriate to infer the vertical spatial variability of K throughout granular porous aquifer media (e.g. sand and gravel aquifers) in which fractures do not play a dominant role. The main reasons are that:

- water wells drilled in porous media typically are screened over a relatively short interval, contrasting with the required open-hole completion geometry for the wells;
- the vertical component of the groundwater flow is seldom negligible in the vicinity of a partially penetrating water well pumping from a porous aquifer whose thickness is much larger than the length of the screened interval of the well, in most cases;
- the depth-integrated nature of well transmissivity, from $\nearrow T^{*}_{\mathrm{dh}}(\nearrow d_{\mathrm{dh}})$ to T^{*}_{w}, as defined in the problem conceptualization, is simply not compatible with short-interval T data, since our concept of well transmissivity requires that the open interval always starts at the very top of the aquifer (i.e. at z = 0.0 m).

Since the stochastic model is one-dimensional and therefore does not explicitly consider the horizontal spatial variability of the properties of the fractured-rock aquifer medium, a verification should be made that the region of interest is adequately divided into relatively homogeneous zones —i.e. zones showing no significant spatial trend in the horizontal direction within them— early in the implementation of the workflow (as instructed in Section 3.1, Step W1), for maximizing the worth of the exercise and the significance of modeling results. Moreover, it is very likely that some changes to the components of the model might be required through the application of the workflow to a new study area. These changes may be limited to the specific values for the many sub-parameters of the stochastic model, in the easy cases, or else they may involve in-depth modifications to the mathematical definition of certain components of the stochastic model or even require, in some cases, the addition of new components to the very structure of the model (or the deliberate deactivation of some components, through the use of existing or new Boolean parameters). This, again, underscores the great flexibility of the stochastic modeling framework.

Furthermore, a key asset of the stochastic modeling workflow is that resulting information about K_{b} are largely constrained by field data, contrary to inferences on K_{b} made following the more common inverse groundwater-flow modeling approach which, in short, consists in deriving a plausible field of $K_{\mathrm{b}}(x,z)$ or $K_{\mathrm{b}}(x,y,z)$ through iterative calibration of a spatially defined groundwater-flow model against field-derived data such as hydraulic heads or subsurface fluid fluxes (e.g. Sanford, 2017).

More generally, the methodology developed in this study provides a bridge between theoretical aspects related to fractured rock media and practical aspects related to the use of readily available and abundant, yet poor-quality, field data for open-hole wells; aspects which, until now, had only been addressed independently. Indeed, on the theoretical side, many studies were conducted

notably to “determine the equivalent permeability of fractured rocks from information on fracture geometry” based on synthetic discrete fracture networks (e.g. Long *et al.*, 1982; de Dreuzy *et al.*, 2002; Li *et al.*, 2016), or to develop empirical models for describing the permeability–depth trend in fractured rock media (e.g. Oda, 1986; Wei *et al.*, 1995; Jiang *et al.*, 2010). On the practical side, numerous studies exploited T(SC) estimates data to examine the spatial variability and dependence of K_{b} in the horizontal or vertical directions throughout regional fractured-rock aquifer systems in various settings (e.g. Davis & Turk, 1964; Wallroth & Rosenbaum, 1996; Wladis *et al.*, 1997; Nastev *et al.*, 2004; Lavigne *et al.*, 2010; Laurencelle *et al.*, 2011; Mortimer *et al.*, 2011; Carrier *et al.*, 2013; Chesnaux, 2013; Lefebvre *et al.*, 2015). But no research had yet considered together the role of fracture geometry (in terms of vertical spatial arrangement and of individual apertures) on the equivalent K_{b}, the relationship between K_{b} and depth, and the SC data from open-hole water wells as a means for connecting the models with an actual field setting, while further taking into account the constraints due to the limited and highly uneven reliability of the T(SC) data estimates.

There are, however, several limitations to the concepts and methodology developed in this work. These limitations are essentially related to large overall uncertainties at both the conceptual and operational levels, from the definition of a fracture transmissivity, through the relationship between well and fracture transmissivities, to the inference of K_{b} for a given z-depth interval in rock, for instance. The limitations thus concern all components of the stochastic model as well as several steps of the proposed stochastic modeling workflow.

The conceptualization of the fractured rock medium is largely simplified compared to reality. It is assumed that the real open fractures can all be represented as parallel-plate fractures having distinct yet uniform hydraulic apertures, so that the transmissivity of any fracture can be derived directly from the fracture aperture using the cubic law. In addition, it is assumed that the contribution of a fracture to the permeability of the rock is a direct function of the fracture transmissivity, and thus that the overall horizontal transmissivity of a “horizontal slice” of rock around an open-hole well is a direct function of the sum of the transmissivities of all fractures connected to the well within that depth interval in rock. In fact, the idealized representation of the fractured rock medium in this research follows concepts developed for theoretical extensive (infinite-size) fracture systems (as in Snow, 1965). Yet, a later study has clearly stressed that real fracture systems are in fact made of non-extensive (finite-size, discontinuous) fractures (Long *et al.*, 1982). The authors of this significant study further stated and proved that a finite-size “fracture can contribute to the permeability of the rock only insofar as it intersects other conducting

fractures", that "in the extreme, an isolated fracture which does not intersect any other fracture effectively contributes nothing to the permeability of the total rock mass", that "flow in any given fracture is not independent of flow in every other fracture" and, as a result, that "the permeability of a network of fractures is not simply the sum of the permeabilities of each fracture." (Long *et al.*, 1982). Given these considerations, the fractures represented in our conceptual model should not only be restricted to open fractures, but must also represent interconnected fractures. Moreover, anisotropy of fractured-rock equivalent K_{b} is simply ignored in our problem conceptualization — since the T(SC) estimates data simply do not allow any assessment of the vertical component of K_{b}— although several studies have shown that anisotropy of rock permeability can be significant in many cases (e.g. Snow, 1969; Zhang & Sanderson, 1996; Yager *et al.*, 2009). Another major assumption is that the fractured rock medium near the open-hole well can be treated interchangeably as a 1D-vertical arrangement of fractures and rock matrix blocks, and as an equivalent porous medium (EPM) with depth-varying K_{b}. Yet, notwithstanding the hypothesis that an EPM may be valid for the larger scales under certain conditions (Long *et al.*, 1982; Cook, 2003; Singhal & Gupta, 2010), it is far less robust at small scale such as that of the restricted volume of rock surrounding an individual well. Accordingly, the assumptions made in our research concerning the relationship between fracture aperture, fracture transmissivity, open-hole well transmissivity, and bulk-rock hydraulic conductivity, are likely an oversimplification of reality. Yet, this research nonetheless relies on the working assumption that assuming an EPM behavior at the near-well scale provides a level of approximation of the real physics that is acceptable from an operational viewpoint, in terms of the overall capability of the methodology to connect field SC data with idealized fracture arrangements, fracture hydraulics and, more directly, well hydraulics.

On the implementation side, the mathematical formulation for the two depth-dependent reference terms of the fractured-rock generation submodel — Equation 25 for $\mathrm{fd}^*(z)$, and Equation 26 for $b_{\mathrm{f}}^*(z_{\mathrm{f}})$— implicitly assumes that both properties of the fracture arrangements are essentially a function of the current lithostatic stress (i.e. the weight of the overburden) and hence, of the depth in rock (z). This assumption thus neglects the weight of the unconsolidated sediments overlying the rock. Also, the proposed idealized formulas for $\mathrm{fd}^*(z)$ and $b_{\mathrm{f}}^*(z_{\mathrm{f}})$ are not compatible with the more complex geological stress histories that took place in some regions of the world. Complex stress histories, which may stem for instance from hydromechanical effects of repeated continental glaciations (Neuzil, 2012), result in a more complex spatial structure of the stress state in the upper bedrock, and hence in altered properties of the fracture network, leading to more convoluted depth trends for $\mathrm{fd}(z)$ and $b_{\mathrm{f}}(z_{\mathrm{f}})$. Accordingly, alternative mathematical definitions for

$\mathrm{fd}^*(z)$ and $b_{\mathrm{f}}^*(z_{\mathrm{f}})$ should be considered whenever the studied rock aquifer system has a complex stress history.

Another concern is the simulation of heterogeneous b_{f} values by the fractured-rock generation submodel. Although literature supports the use of a power law to represent the distribution of b_{f} (de Dreuzy *et al.*, 2002; Ortega *et al.*, 2006), our choice to use the uncommon upper truncated shifted Pareto distribution for simulating heterogeneous fracture apertures is unconventional —it has indeed never been used for that purpose before. Moreover, there are some inconsistencies in the current implementation that is proposed for the b_{f} stochastic variable. Firstly, a large part of the simulated b_{f} values in fact do not respect the asymptotic minimum residual fracture aperture ($b_{\mathrm{f}} < b_{\mathrm{fr}}$), since the key heterogeneity term ($H_{\mathrm{bf.f}}$) multiplies $b_{\mathrm{f}}^*(z_{\mathrm{f}})$ directly instead of rescaling the difference $b_{\mathrm{f}}^*(z_{\mathrm{f}}) - b_{\mathrm{fr}}$. Secondly, for the same reason, the variation with depth of the upper bound of the simulated heterogeneous b_{f} values strictly follows that of the $b_{\mathrm{f}}^*(z_{\mathrm{f}})$ model, and thus appears a bit too constrained. Finally, the extreme right-skewness of $H_{\mathrm{bf.f}}$ —due to the use of a power-law type distribution— implies that a large proportion of the simulated fractures are assigned very small apertures, meaning virtually negligible fracture transmissivities, which may be inconsistent with the definition for the fractures in $\mathrm{fd}^*(z)$ expecting the generated fractures to count in all cases, i.e. to be non-negligible hydraulically-active water-bearing discontinuities. Despite these imperfections, the successful application of the methodology in the case study shows that the current implementation for the b_{f} stochastic variable can work well and usefully in practice.

The conceptualization of the drillers' multi-criteria decision-making process regarding the end depth for the open boreholes, although globally plausible, remains largely hypothetical. Notably, some of the proposed criteria may be inapt or incomplete, or there may be other factors involved. For example, in the St. Lawrence Platform zone of our study area, brackish groundwater is found very frequently in the rock aquifer, meaning a poor groundwater quality in the affected wells (Beaudry *et al.*, 2018). Accordingly, in such a setting, well drillers probably also check the quality of the groundwater in the drill hole during the drilling operation, to ensure that it meets the standards, or else stop drilling when it is concluded that the drilling location cannot offer good-quality groundwater. Thus, criteria related to the local groundwater quality or various other environmental factors might be required as additional drilling-depth criteria, for a successful implementation of the proposed stochastic modeling framework to certain regions.

Moreover, well-drillers' sampling bias may not be the only bias involved in the problem. Biases of other types could indeed affect some regional databases, and maybe even that of our study area. One that can have a significant biasing effect in various settings is the reporting bias. This bias

occurs when the reporting and hence the availability of the SC data are not independent of well yield, and is generally due to a tendency to report mostly the high-yield wells (having a satisfying productivity) and much less frequently the low-yield wells (especially when they are considered as 'failures'). The reporting bias is expected to be minimal in regions of the world with a humid climate, where the low-yield wells are very rarely abandoned once they are drilled. The client indeed gets along with the low-yield well, most often, since it remains reliable for its slow yet constantly renewed groundwater storage, which meets the limited needs of most private well owners. Conversely, the reporting bias is expected to be much stronger in regions of the world with a dry climate, where low-yield wells can hardly play a similar role of water storage and are thus often simply abandoned or, at least, not reported after they are drilled and tested. Accordingly, the reporting bias is an actual phenomenon that should not be disregarded when implementing the proposed methodology, especially when investigating dry-climate regions (e.g. Carrier *et al.*, 2011), but also more humid-climate regions (e.g. Allen *et al.*, 1997; Abesser & Lewis, 2015). Another type of bias, that is rather ubiquitous under real conditions, is the location bias, which in fact concerns virtually all regional databases of private water well data. The main factor for this bias is that private water wells are requisitely "drilled close to where people have their houses", and thus concentrate in the vicinity of the road network, and are generally more numerous in flat areas (plains, valleys, lowlands) compared to rugged areas (hills, uplands), which explains the symptomatic non-random "spread of well locations" across most regions (Wallroth & Rosenbaum, 1996). Yet, according to another study, the topographic setting (which is a key expression of the location) in fact remains a "weak indicator of specific capacity" (Knopman & Hollyday, 1993). Accordingly, the locations bias is expected to have a practically negligible impact on the quality of the inferred statistics for K_{b}, in general, and may not need to be integrated into the stochastic model.

The numerical implementation of the concepts related to well drilling operations is subject to many uncertainties as well. Indeed, the formulas proposed to model the criteria C1 and C3 are rather arbitrary, while the algorithm proposed to model criterion C2, although based on the numerical simulation of realistic groundwater pumping scenarios (see Annexe A7.2), still remains partly arbitrary. These hypothetical models can still be considered to set up the drilling submodel, in practice, based on the premise that a successful calibration of the stochastic model (in the biased drilling mode) confirms that the practices of the well drillers were reasonably well reproduced by the calibrated drilling submodel and, by extension, validates every component of the drilling submodel. Nevertheless, the fact remains that neither the mathematical formulas nor the numerical implementation of these three criteria in the case study of this paper are grounded on

validated knowledge about the actual practices of well drillers throughout the study area. Accordingly, we stress that the drilling submodel could be greatly improved on the basis of a more factual and complete picture of the real practices of well drillers in the studied region.

There are several limitations to the stochastic modeling workflow itself. First, the complex problem it tries to solve is actually an inverse problem: the stochastic model is calibrated against observed data in order to find an optimal set of sub-parameters for the fractured-rock generation submodel —that submodel computes K_{b} estimates for all simulated wells and, from there, detailed statistics on $\log K_{\mathrm{b}}\,(z)$ that are finally used to infer the vertical spatial variability of $\log K_{\mathrm{b}}$ throughout the real aquifer system. There is, at least in theory, an infinite number of ways in which a problem of such type can be solved with a comparably good fit of the model (in terms of $T_{\mathrm{w}}^{*}, d_{\mathrm{w}}$ data). Therefore, significant different solutions to the problem can be obtained in terms of statistics on $\log K_{\mathrm{b}}\,(z)$, depending on the way in which the manual model calibration is carried out. The stochastic modeling is thus prone to the inescapable non-uniqueness of the inverse problem and of the proposed numerical solution.

Moreover, the input data required in the initial setup and subsequent calibration of the stochastic model are in fact systematically affected by uncertainties due to ubiquitous errors of various sources and magnitudes. Hence, it is acceptable if the initially estimated values for some of the model sub-parameters are set up a priori based on field-derived data, and then are significantly altered during the model calibration process. Part of the discrepancy between calibrated and initial values for these sub-parameters may indeed be explained by inaccuracies in the input data rather than improper calibration. Similarly, the limited and highly uneven reliability of the input T(SC) data used to prepare the observed statistics for the purpose of model calibration implies that observed statistics have a limited reliability as well, and hence further contributes to the overall uncertainty of the stochastic modeling workflow.

In order to overcome some of these limitations, a more advanced calibration procedure could be considered that would be able to find solutions to the inverse problem which provide a better fit through an automated procedure involving simultaneous adjustment of all model sub-parameters, such as the non-linear parameter estimation method PEST (Doherty, 1994).

5. Summary and conclusions

5.1 Flaws of the conventional approach

Hydraulic characterization of a shallow rock aquifer system at the regional scale relies primarily on specific-capacity test (SC) data reported by well drillers, from which well transmissivity (T_w) estimates can be derived easily, most commonly using an analytical method. The conventional approach for inferring the vertical spatial variability of bulk-rock hydraulic conductivity (K_b) throughout a regional fractured-rock aquifer system from T_w estimates data consists essentially in calculating $K_{(T)}$ estimates by dividing the T_w estimates by the length of the open section of the wells in rock, attaching to each $K_{(T)}$ estimate a vertical coordinate (z) determined as the depth of the middle of the open section, then computing statistics of $\log K_{(T)}$ with respect to z, to finally infer a regionally-representative vertical profile of $\log K_b\,(z)$ by assuming that the spatial structure of the $K_{(T)}$ estimates is very similar to that of actual K_b in the studied aquifer.

This research has examined the validity of this conventional approach and has highlighted three major conceptual flaws: 1) it does not take into account the limited and highly uneven reliability of well-transmissivity estimates (T_w) derived from the SC data, 2) it treats the depth dependence of T_w and K_b in a mutually inconsistent manner, and 3) it improperly interprets the generally observed depth-decreasing trend of T_w since it overlooks the strong bias in the SC data.

The examination of the conventional approach has thus stressed the need for a more coherent and reliable method to infer a regionally representative $\log K_b\,(z)$ vertical profile from SC data affected by well-drillers' sampling bias.

5.2 The new methodology proposed in this paper

An operational methodology was developed to exploit T_w estimates derived from SC data, which considers the sampling bias in the SC data as well as the limited and highly uneven reliability of the T_w estimates. The proposed method is essentially based on a stochastic model implemented with a Monte Carlo approach and including two interacting submodels: 1) a fractured-rock generation submodel to simulate random arrangements of heterogeneous fractures and produce a large number of 1D-z fractured-rock aquifer columns ("samples") across a virtual aquifer medium, and 2) a drilling submodel that simulates the drilling of open-hole wells through these simulated aquifer columns, to either non-random (representing well-drillers' sampling bias) or

purely-random (unbiased) depths in rock (d_w). The outputs of the stochastic model thus comprise both simulated well data (well depths in rock d_w, and well transmissivities T_w^*) and simulated fracture data (fracture depths in rock z_f, fracture apertures b_f, and fracture transmissivities T_f).

The stochastic model is integrated into a workflow involving first a calibration of the stochastic model by fitting the simulated well data against region-specific observed well data, and then the processing of the "optimal" simulated fracture properties allowing the computation of detailed statistics on K_b with respect to depth in rock (z) and thus, finally, infer a regionally-representative vertical profile of $\log K_b\,(z)$ within probability bounds.

The stochastic modeling workflow was successfully applied to the regional-scale hydraulic characterization of a fractured sedimentary-rock aquifer system in southwestern Quebec (Canada) comprising three distinct hydrogeological contexts. In addition to demonstrating the suitability of the methodology to meet the primary objective of the present research, results from the case study support the following conclusions:

- The depth-decreasing trend of $\log T_w^*\,(d_w)$ that is systematically observed when exploiting regional SC data from fractured-rock aquifer systems is definitely an artifact of the sampling bias due to well-drillers practical constraints (i.e. the well-drillers' multi-criteria decision-making process regarding the drilling end depth of open-hole wells). Although the significance of well-drillers' sampling bias was previously recognized, this study better explains how this bias impacts the produced regional trend of $\log T_w^*\,(d_w)$. In order for the well-drillers' sampling bias to effectively result in a depth-decreasing trend of $\log T_w^*\,(d_w)$, the fractured rock medium must be highly heterogeneous in terms of fracture apertures (b_f) and hence fracture transmissivities (T_f). Accordingly, the depth-decreasing nature of an observed $\log T_w^*\,(d_w)$ trend is thus a strong indication that b_f and T_f are largely variable throughout the actual fractured-rock aquifer system being investigated.

- Vertical profiles of median $\log T_w^*\,(d_w)$ obtained from biased and from unbiased sampling of a fractured-rock medium are completely different. Average $\log T_w^*$ is indeed strictly and rapidly increasing with d_w in the unbiased profiles, thereby underscoring that the overall probability of obtaining a well with a satisfying transmissivity actually increases as a function of d_w, contrary to the findings of previous studies (e.g. Davis & Turk, 1964).

- The vertical distribution of well depths observed from a biased sample is far from uniform; it rather tends to take the form of a positively skewed bell-shaped curve. This indicates that open-hole water wells generally are preferentially drilled to shallow depths in the rock

aquifer, as a result of the customary practices of the well drillers. Non-uniformity of the vertical distribution of well depths is thus a strong indication of well-drillers' sampling bias.

- Heterogeneity of fracture apertures (b_{f}), and hence of fracture transmissivities (T_{f}), has a much larger impact on the simulated well depths in rock (d_{w}) than the decrease with depth in either average fracture aperture $b_{\mathrm{f}}^{*}(z_{\mathrm{f}})$ or fracture density $\mathrm{fd}^{*}(z)$.
- One of the main challenges in implementing the proposed stochastic modeling workflow resides in finding an optimal parameterization for all the model components through a successful manual calibration against observed well data while further ensuring that both the input parameters and the simulated outputs of the model keep within plausible ranges.
- Calculated vertical distribution of well depths and computed quantile statistics about $\log T_{\mathrm{w}}^{*}$ are equally important calibration targets. A successfully calibrated stochastic model should therefore reproduce as closely as possible both kinds of observed statistics.

5.3 General conclusion

Implementation of the stochastic modeling workflow for any new study area will most likely require substantial changes in the parameterization and even, in some cases, more in-depth modifications to the components of the stochastic model. Furthermore, notwithstanding the apparently good applicability of the stochastic modeling framework in its current form, the operational methodology and its underlying concepts still show several limitations, notably regarding the multiple components of the stochastic model and the stochastic modeling workflow itself. Nevertheless, the vast majority of the identified limitations can a priori be overcome.

This research underscores that it is effectively possible to learn a lot about the fracture properties and bulk-rock hydraulic conductivity of a fractured-rock aquifer system through exploitation of widely available specific capacity data, provided that well-drillers' sampling bias and the highly uneven reliability of the T_{w} estimates are fully considered. The operational methodology developed in this study bridges the gap between the theoretical aspects related to fractured rock media and practical aspects related to the use of readily available specific capacity data, aspects that had only been addressed separately before. This study thus has both practical and theoretical outcomes. On the one hand, it provides an operational methodology enabling the inference of regionally-representative vertical profiles of $\log K_{\mathrm{b}}(z)$ and their uncertainty bounds, potentially applicable to most fractured-rock aquifer systems. On the other hand, it tackles, highlights, and resolves many general issues related to this complex inverse problem.

6. Acknowledgements

The first author thanks NSERC for their financial contribution to his PhD research project. I need to acknowledge the kind and significant contribution of several persons, namely my colleague students Pierre Masselot, Jean-Sébastien Gosselin, Pierre Ladevèze, and Gabriel Fabien-Ouellet for their helpful tips and ideas related to programming, statistics, graphical presentation of results, etc.; Louis Laurencelle, Ph.D., for his suggestions in the setup of the Monte Carlo model; and Daniel Paradis, Ph.D., for his help in structuring the paper. Thanks are also due to the members of the thesis examination committee, Kent Novakowski, Daniel Paradis, Olivier Bour, John Molson, and Michel Parent, for their valuable and constructive comments.

The interested reader can download the various program codes developed in the R programming language (R Core Team, 2017), that are provided in Annexe A7.7.

CHAPITRE 8 : CONDITIONS PALÉO-HYDROGÉOLOGIQUES ET PROCESSUS D'INVASION PAR LA MER DE CHAMPLAIN D'UN SYSTÈME AQUIFÈRE ROCHEUX RÉGIONAL DU SUD DU QUÉBEC

Title (translated)

Paleo-hydrogeological conditions and processes during the invasion of a regional rock aquifer system from southern Quebec by the Champlain Sea

Auteurs

Marc Laurencelle[1], René Lefebvre[1], Michel Parent[2], John Molson[3]

[1] Institut national de la recherche scientifique, Centre Eau Terre Environnement (INRS-ETE), 490 rue de la Couronne, Québec, Québec, Canada

[2] Commission Géologique du Canada, Division Québec, 490 rue de la Couronne, Québec, Québec, Canada

[3] Université Laval, Département de géologie et de génie géologique, Faculté des sciences et de génie, 1065, av. de la Médecine, Québec, Québec, Canada

Statut de la publication

A traduire en anglais puis soumettre à la revue *Earth System Dynamics*.

Contribution de l'étudiant et des co-auteurs

Marc Laurencelle a réalisé la recherche exploratoire puis expérimentale (numérique), développé la méthodologie, programmé les codes informatiques, produit les résultats, et rédigé l'article.

René Lefebvre a identifié l'intérêt de traiter la problématique, suivi les travaux, apporté des contributions fondamentales au niveau des concepts et des stratégies d'abord du problème, participé à la rédaction de l'article, et révisé et commenté en profondeur l'article.

Michel Parent a apporté des contributions importantes au niveau de l'historique quaternaire, et suivi avec intérêt les travaux.

John Molson a contribué au développement initial des approches de simulation (SALTFLOW) et apporté des conseils utiles à l'amélioration de la méthodologie.

Résumé

À la fin de la dernière glaciation il y a environ 13 000 ans, un bras de mer de l'océan Atlantique, nommé Mer de Champlain, a envahi les basses terres de la Vallée du Saint-Laurent (dans le sud du Québec) pendant 2 000 ans. Cette incursion a mené à l'invasion d'eau marine dans les systèmes aquifères de la vallée alors inondés par cette mer postglaciaire. Les impacts de cette invasion marine sont particulièrement visibles en Montérégie Est, où le système aquifère rocheux fracturé régional contient des eaux saumâtres (avec des salinités pouvant aller jusqu'à ~12 g/L) sur plus de 2 000 km^2. De telles invasions marines ont, de fait, laissé une forte empreinte sur la géochimie d'eaux souterraines retrouvées en plusieurs endroits dans le monde. Malgré cette importance, très peu d'études ont tenté de reconstituer les paléoconditions et la dynamique sous lesquelles s'est faite l'invasion marine postglaciaire des aquifères. L'objectif central des travaux documentés dans cet article était ainsi de mieux comprendre les processus en jeu dans l'invasion d'eau marine des systèmes aquifères sous les paléoconditions ayant prévalu dans le sud du Québec. Les travaux ont été fondés sur un modèle conceptuel qui considère l'évolution temporelle des paléoconditions marines (niveau d'eau et salinité), la mise en place d'un aquitard argileux sur le fond marin et la diminution de la conductivité hydraulique de l'aquifère rocheux avec la profondeur. Les processus régissant le transport de la salinité ont été investigués à partir de modèles considérant des conditions allant de très simples à plus complexes et réalistes. Certains des modèles numériques ont été préparés puis simulés dans l'environnement de programmation R, et d'autres avec le logiciel FEFLOW. Les paléoconditions et processus en jeu ont d'abord été étudiés à l'aide de modèles numériques en une dimension (colonnes 1D verticales) et ensuite été simulés de façon combinée sur une coupe 2D verticale représentant schématiquement la région d'étude.

Les résultats démontrent l'impact majeur de la sédimentation d'un aquitard argileux sur le fond marin, non seulement pendant mais aussi après l'épisode marin. L'aquitard en formation a tôt fait de freiner l'invasion marine directe de l'aquifère rocheux sous-jacent. La période d'invasion marine ouverte à la mer et dominée par l'entraînement densitaire des eaux marines dans l'aquifère rocheux est ainsi très courte (de l'ordre de 250 ans). Une partie de la salinité emmagasinée dans le grand volume d'eau piégée dans l'aquitard continue toutefois à être émise dans l'aquifère et ce, même après que l'aquitard soit entièrement formé, ce qui prolonge d'autant l'invasion d'eau marine dans l'aquifère. La consolidation de l'aquitard argileux pendant sa formation apparaît capable de transférer des volumes considérables d'eaux salées vers l'aquifère rocheux. L'aquitard joue aussi son rôle « d'obstacle isolateur », en empêchant la recharge directe de l'aquifère et le

lessivage de l'eau marine qui y a été introduite, d'où la conservation d'importants volumes d'eau souterraine saumâtre dans le système aquifère régional, à la fois dans l'aquitard argileux et dans l'aquifère rocheux sous-jacent. Les simulations en 2D montrent que la pénétration de l'eau marine dans l'aquifère rocheux est fortement dépendante du taux de décroissance de la conductivité hydraulique avec la profondeur dans celui-ci. Elles révèlent également que de l'eau douce migre vers le haut dans l'aquifère rocheux, par effet de densité, lors de l'invasion marine, puis s'accumule provisoirement à proximité de la base de l'aquitard. Mais surtout, les simulations 2D mettent en évidence la circulation convective de l'eau souterraine due à ses importants contrastes de salinité et donc de densité. L'entraînement densitaire de doigts d'eaux salées vers la profondeur s'avère un mécanisme d'invasion important, et encore actif aujourd'hui. La convection-dispersion joue un rôle dominant dans la migration de la salinité au sein de l'aquifère rocheux, et ce, même dans ses zones captives sous un épais aquitard argileux. Dans les zones libres d'argiles, le lessivage des eaux salées par la circulation convective d'eaux douces devient le processus prédominant dès le retrait des eaux inondantes, et mène à une évacuation quasi complète des eaux marines précédemment introduites dans l'aquifère rocheux. À l'opposé, là où la couverture argileuse est épaisse, le lessivage de l'aquifère rocheux s'avère quasi nul, expliquant la présence actuelle d'eaux souterraines saumâtres dans ces grandes zones captives de l'aquifère rocheux régional. De plus, les simulations tant 1D que 2D mettent en évidence que c'est principalement la diffusion qui contrôle l'évolution post-marine de la salinité maximale pouvant être rencontrée dans la partie supérieure du système aquifère, principalement en évacuant peu à peu son stock de salinité vers la surface. Les résultats montrent, en outre, qu'il est fort probable que les eaux profondes de la Mer de Champlain aient eu une salinité marine normale (~35 g/L) durant la plus grande partie de l'épisode marin. Les salinités maximales observées aujourd'hui dans la zone d'eaux saumâtres en Montérégie Est (~12 g/L) ne seraient donc pas directement représentatives de la salinité d'une eau marine diluée au départ, mais plutôt le résultat de la longue évolution interne des salinités au sein du système aquifère.

Malgré une connaissance encore limitée des paléoconditions et des propriétés hydrauliques du système aquifère régional, ces travaux donnent une explication plausible et quantitative de la salinité passée à actuelle de l'eau souterraine dans l'aquitard argileux et l'aquifère rocheux de la Montérégie Est. Les travaux fournissent surtout une bien meilleure compréhension des processus d'invasion marine des aquifères rocheux sous des paléoconditions réalistes qui pourraient être applicables à d'autres régions ayant subi des invasions marines postglaciaires.

Abstract

At the end of the last glaciation about 13,000 years ago, an arm of the Atlantic Ocean, named Champlain Sea, invaded the St. Lawrence Valley (in southern Quebec) over a period of about 2,000 years. This marine water invaded the underlying aquifers, which is especially apparent in the Montérégie Est region where the regional fractured-rock aquifer system contains brackish water (with salinities up to ~12 g/L) distributed over an area of about 2,000 km^2. Similar marine invasions have left a geochemical imprint on groundwaters found in several places around the globe. Despite the importance of the marine invasion phenomenon at the global scale, few studies have tried to reconstruct the paleoconditions under which postglacial marine invasion of aquifers have occurred. The central objective of this study was thus to better understand the processes involved in the marine invasion of aquifers under the paleoconditions prevailing in southern Quebec. This work was based on a conceptual model considering the temporal evolution of marine paleoconditions (water level and salinity), the formation through sedimentation of a clayey aquitard on the sea bottom, and a decrease in hydraulic conductivity with depth in the fractured rock aquifer. Processes governing the subsurface transport of salinity were investigated using models considering increasingly more complex and realistic conditions. The numerical models were prepared and simulated using either the R programming environment or the FEFLOW software. The subsurface transport of salinity was first studied with numerical 1D vertical models, and then the combined paleoconditions and processes involved were simulated in a 2D vertical cross-section representing schematically the study area.

Simulation results show a major impact, on the marine water invasion process, of the clay aquitard sedimentation on the sea bottom, not only during but also after the marine episode. First, the forming aquitard soon restricts direct marine invasion of the underlying rock aquifer. The density-driven open marine invasion of the rock aquifer is thus limited to a short period in the order of 250 years. Second, part of the salinity stored in the large volume of water trapped within the clayey sediments forming the aquitard continue, however, to be expelled in the aquifer, even after the formation of the aquitard is completed, thereby prolonging the marine-water invasion in the aquifer. Third, consolidation of the clay aquitard during its formation appears to transfer significant volumes of saltwater to the rock aquifer. Fourth, the aquitard also acts as a major “hydraulic obstacle”, by hindering direct recharge of the rock aquifer and thus preventing leaching of the marine waters previously introduced in the aquifer, hence leading to the preservation of important volumes of brackish groundwater in the regional aquifer system, both in the clay aquitard and in the underlying rock aquifer. Moreover, the 2D numerical simulations show that the depth of seawater penetration

strongly depends on the rate of decrease of hydraulic conductivity with depth in the rock aquifer. They also reveal that fresh groundwater migrating upward in parallel with the descent of denser seawater, accumulates more or less temporarily in a thin interval under the aquitard. More importantly, the 2D simulations highlight the convective nature of groundwater flow within the rock aquifer, which is initiated and then maintained by the important contrasts of groundwater salinity and hence density. Density-driven fingering and sinking of the introduced saltwater are appear to be especially important marine-invasion processes, and still active today. Convection-dispersion in fact appears to play the dominant role in controlling the migration of groundwater salinity within the rock aquifer, and this, notably in the zones where it is confined under a thick clay aquitard. In higher, clay-free areas, saltwater leaching by fresh groundwater becomes the dominant process right after the retreat of the flooding waters, and leads to an almost total removal of the marine waters previously introduced in the rock aquifer. In contrast, it is almost nonexistent where the clay cover is thick. Moreover, 1D and 2D simulation results underscore that it is primarily the diffusion that controls the post-marine evolution of maximum salinity within the upper part of the aquifer system, mostly through progressive expulsion of the system's salinity content to the surface. Furthermore, this work shows that the deeper waters of the Champlain Sea most likely had a normal seawater salinity (~35 g/L) during most of the marine episode. Present-day maximum observed salinities in the brackish groundwater zone of the Montérégie Est area would indeed not be directly representative of an originally diluted seawater, but rather the result of the long-term internal evolution (and overall reduction) of groundwater salinity within the regional aquifer system.

In sum, even though our knowledge of the paleoconditions and the hydraulic properties of the regional aquifer system is limited, the present study provides a plausible explanation for past to present-day groundwater salinity in the clay aquitard and rock aquifer of the Montérégie Est area. This study especially provides a much better understanding of marine water invasion processes under realistic paleoconditions that could be applicable to other regions where postglacial marine invasions have occurred.

Mots clés / Keywords

paléo-hydrogéologie ; salinité ; modélisation numérique ; invasion marine ; Mer de Champlain

paleo-hydrogeology; salinity; numerical modeling; marine invasion; Champlain Sea

1. Introduction

Durant le Quaternaire, les calottes glaciaires ont connu plusieurs cycles de croissance – décroissance liés aux variations du paléoclimat (Hughes, 1998; Petit *et al.*, 1999). En Amérique du Nord, lors du dernier maximum glaciaire (DMG), évalué avoir été atteint autour de 21 à 26 cal ka BP (Dyke, 2004; Peltier & Fairbanks, 2006; Stokes *et al.*, 2012; Peltier *et al.*, 2015), le Canada était presque entièrement couvert par l'Inlandsis laurentidien, dont l'épaisseur de glace dépassait vraisemblablement les 2 000 m sur la majorité de son territoire, d'après des modélisations géophysiques globales récentes (Peltier *et al.*, 2015; Simon *et al.*, 2016). La décroissance de l'Inlandsis laurentidien qui a suivi le DMG fut environ dix fois plus rapide que sa croissance (Stokes *et al.*, 2012), menant ultimement à une déglaciation pratiquement complète de l'Amérique du Nord vers 6 cal ka BP (Dyke, 2004; Simon *et al.*, 2016).

En territoire canadien, le poids exercé par cette immense masse de glace a induit un important affaissement de la croûte terrestre de plusieurs dizaines à centaines de mètres, jusqu'au DMG; la croûte s'est ensuite relevée avec la diminution progressive de ce poids, par ajustement glacio-isostatique (Peltier *et al.*, 2015). Le niveau moyen des mers, lié au cycle glaciaire par la glacio-eustasie, a lui aussi fluctué de plusieurs dizaines de mètres, selon la proportion des eaux mondiales figées dans les calottes glaciaires, jusqu'à atteindre, au DMG, un niveau minimal de 120–130 m inférieur au niveau actuel (Clark & Mix, 2002; Peltier & Fairbanks, 2006). Ainsi, lors de la déglaciation wisconsinienne, le recul rapide des marges de l'Inlandsis laurentidien, combiné à l'état régionalement affaissé de la croûte continentale ainsi qu'à un niveau marin global en évolution glacio-eustatique rapide, a permis l'incursion d'eaux marines d'origine océanique dans plusieurs régions alors déprimées.

Ce fut notamment le cas dans la Vallée du Saint-Laurent, à l'est du Canada (Ontario et Québec). Ces basses terres furent largement envahies par un bras de mer en provenance de l'océan Atlantique, durant quelque deux millénaires (Occhietti *et al.*, 2001a; Occhietti & Richard, 2003). Une conséquence hydrogéologique majeure de cette invasion marine a été l'intrusion d'eau marine dans les aquifères recouverts par la Mer de Champlain, dont on trouve actuellement la trace sous forme d'eaux souterraines saumâtres en plusieurs endroits dans la Vallée du Saint-Laurent ainsi que des évidences de mélange de l'eau souterraine douce avec une composante marine (Quigley *et al.*, 1983; Torrance, 1988; Desaulniers & Cherry, 1989; Woodley, 1996; Giudice & Broster, 2006; Benabdallah, 2010; Blanchette *et al.*, 2010; Cloutier *et al.*, 2010; Duhaime *et al.*, 2013; Montcoudiol *et al.*, 2014; Beaudry *et al.*, 2018).

Plus particulièrement, dans la région investiguée dans cette étude, dénommée Montérégie Est et située tout au sud du Québec à l'est de Montréal, le système aquifère rocheux fracturé régional contient actuellement des eaux souterraines saumâtres sur une vaste zone s'étendant sur plus de 2 000 km^2, et ce depuis de faibles profondeurs (Beaudry *et al.*, 2011; Carrier *et al.*, 2013; Beaudry *et al.*, 2018). L'origine principalement marine de la salinité élevée des eaux souterraines dans cette zone a été confirmée par plusieurs évidences hydrogéochimiques et ainsi attribuée à l'épisode d'incursion marine postglaciaire de la Mer de Champlain dans la Vallée du Saint-Laurent (Beaudry *et al.*, 2018). Les travaux de Beaudry *et al.* (2011) ont montré, de plus, que la distribution de ces eaux saumâtres peut être en partie expliquée grâce à certaines informations géographiques clés décrivant l'environnement hydrogéologique actuel. En particulier, leur étude a révélé que la présence d'eaux souterraines saumâtres est corrélée avec la présence d'une épaisse couverture de sédiments silto-argileux très peu perméables ainsi que d'une topographie plane, que l'extension actuelle de la zone d'eaux souterraines saumâtres s'avère beaucoup plus limitée que celle de l'extension maximale des surfaces ayant jadis été inondées par les eaux marines de la Mer de Champlain et que, en lien, cette zone saumâtre est entièrement contenue à l'intérieur du territoire jadis couvert par la mer, suggérant une fois de plus l'origine marine de cette salinité souterraine héritée. De plus, l'analyse de la composition chimique des eaux souterraines échantillonnées dans la zone saumâtre de la région et dans des contextes similaires ailleurs dans la Vallée du Saint-Laurent a montré que les eaux souterraines ont en fait des salinités actuelles nettement inférieures à la salinité moyenne des océans (~35 g/L), tant dans le roc que dans les sédiments silto-argileux sus-jacents (~0–15 g/L) (Desaulniers & Cherry, 1989; Cloutier *et al.*, 2006; Cloutier *et al.*, 2010; Beaudry *et al.*, 2011; Beaudry *et al.*, 2018). Plusieurs hypothèses ont été proposées dans la littérature pour expliquer ce fait. Certains auteurs ont conçu que la salinité des eaux de la Mer de Champlain devait avoir été du même ordre que la salinité maximale actuellement observée dans les secteurs hydrauliquement isolés des systèmes aquifères régionaux de la Vallée du Saint-Laurent, et ils en ont conclu que la Mer de Champlain devait être un mélange composé d'environ 1/3 d'eaux salées (en provenance du Golfe du Saint-Laurent) et 2/3 d'eaux douces (associées à la fonte glaciaire ainsi qu'aux précipitations) (Desaulniers & Cherry, 1989; Cloutier *et al.*, 2010). D'autres études hydrogéologiques ont cependant infirmé cette hypothèse en montrant, à l'échelle locale de quelques sites d'étude, que la salinité souterraine des systèmes aquifères de la Vallée du Saint-Laurent aurait en fait évolué de façon importante depuis sa mise en place, et ce y compris dans les unités silto-argileuses très peu perméables, avec la migration diffusive (lorsque la perméabilité est très faible) et advective-dispersive des substances dissoutes installées dans la sous-surface lors de l'invasion marine des basses terres

(Benabdallah, 2010). Une migration prolongée de la salinité souterraine pourrait effectivement expliquer pourquoi même les salinités les plus élevées demeurent nettement inférieures à la salinité océanique, sans que cela suppose une Mer de Champlain de salinité moindre.

Néanmoins, à la connaissance des auteurs, aucune étude n'a encore investigué en profondeur la dynamique de mise en place de la salinité souterraine et puis son évolution jusqu'à aujourd'hui, de façon quantitative et pour un système aquifère entier — c.-à-d. à la fois pour l'aquifère rocheux régional et pour l'unité aquitard sus-jacente formée par les sédiments silto-argileux — ayant été jadis inondé par une mer transgressive postglaciaire en général, et plus particulièrement par la Mer de Champlain. En somme, l'état actuel des connaissances scientifiques relatives à la salinité notable des eaux souterraines des aquifères rocheux en plusieurs secteurs de la Vallée du Saint-Laurent se résume essentiellement à leur caractérisation géographique et hydrogéochimique factuelle et contemporaine.

En réponse à ce manque, la présente recherche est centrée sur l'étude paléo-hydrogéologique de la dynamique transitoire d'un système aquifère régional jadis envahi par la Mer de Champlain, et elle a comme principaux objectifs de :

- Reconstituer quantitativement l'évolution postglaciaire de la dynamique d'écoulement des eaux souterraines et de la migration associée de la salinité dans le système aquifère régional de la Montérégie Est, du début de l'incursion de la Mer de Champlain dans la région, jusqu'à aujourd'hui, et même dans le futur lorsqu'approprié ;
- Déterminer les processus clés ayant contrôlé cette évolution, en étudiant notamment le rôle de l'aquitard argileux déposé sur le fond marin pendant et après sa formation, et en considérant les effets de la densité variable dus à la salinité élevée des eaux marines introduites dans le système ;
- Fournir une explication quantitative de la salinité actuelle des eaux souterraines dans le système aquifère régional ;
- Améliorer la connaissance scientifique générale sur les effets que peuvent avoir les transgressions-régressions marines de grande amplitude sur les systèmes aquifères régionaux. Ce dernier objectif permet de donner une idée du temps requis pour qu'un système aquifère régional retrouve un équilibre hydraulique et géochimique suite à un événement paléo-hydrogéologique perturbateur majeur.

2. Méthodologie générale

L'approche suivie dans cette étude repose principalement sur la modélisation hydrogéologique numérique. Les modèles hydrogéologiques développés visant avant tout une amélioration de la compréhension générale des effets que peuvent avoir les transgressions-régressions marines de grande amplitude sur les systèmes aquifères régionaux, le degré de complexité intégré à ceux-ci est intentionnellement limité, suivant le principe de parcimonie recommandé par Hill (2006). La mise en œuvre de modélisations simples permet effectivement de se concentrer sur l'étude des processus tout en maximisant la transparence des modèles numériques développés (Hill, 2006). Ce choix méthodologique de la simplicité des modèles découle aussi du fait que la disponibilité de données de validation s'avère très limitée en ce qui concerne la salinité actuelle et surtout la salinité passée des eaux souterraines au sein du système aquifère régional étudié, surtout dans le roc. Les modèles hydrogéologiques numériques développés sont tous issus d'un modèle conceptuel préparé préalablement et fondé sur la revue des paléoconditions ainsi que sur le contexte hydrogéologique actuel. Les travaux se déploient ainsi en trois phases.

Tout d'abord, un inventaire ciblé de la littérature est réalisé afin de trouver les informations nécessaires à la conceptualisation du problème paléo-hydrogéologique investigué. D'une part, des données géographiques, géologiques, hydrogéologiques et hydrogéochimiques sur la région d'étude (ou sur d'autres régions en contextes similaires) sont extraites puis mises à profit pour décrire la région d'étude, le système aquifère régional (comprenant à la fois le système aquifère rocheux fracturé régional et l'aquitard silto-argileux sus-jacent) et les conditions de surface dans leur état actuel. D'autre part, un exercice moins courant, mais tout aussi important pour les fins de la présente étude, est fait pour dénicher, extraire, puis colliger les données nécessaires à la reconstitution de l'évolution des paléoconditions environnementales jadis imposées à la surface du système aquifère régional. L'ensemble de l'information ainsi réunie est intégré dans un modèle conceptuel représentant à la fois le système aquifère régional à l'étude, l'évolution des paléoconditions environnementales dans la région depuis le début de l'incursion marine jusqu'à aujourd'hui, ainsi que les processus souterrains envisagés comme les plus déterminants dans l'évolution spatiotemporelle de la salinité des eaux souterraines à l'intérieur du système aquifère.

Ensuite, des modèles hydrogéologiques numériques unidimensionnels relativement simples sont préparés dans le but précis d'étudier les rôles et l'importance relative de chacun des processus impliqués dans le transport souterrain de la salinité. Cette première série de modélisations numériques porte sur l'étude de la mise en place puis du transport de la salinité au sein de

l’aquitard argileux. Les processus sont étudiés séparément dans la mesure du possible, puis progressivement combinés, c’est-à-dire couplés à l’intérieur d’un même modèle.

Enfin, un modèle hydrogéologique numérique (en coupe 2D verticale) jugé davantage représentatif du système aquifère régional réel est développé afin de simuler l’évolution spatiotemporelle de l’état du système, tant en termes de charges hydrauliques et d’écoulements souterrains que de migration de la salinité, en régime transitoire, de façon continue sur toute la période investiguée, soit de la fin de la déglaciation jusqu’à aujourd’hui. Ce modèle plus élaboré reproduit notamment le processus de formation de l’aquitard argileux, les effets de la densité variable de l’eau souterraine liés à sa salinité, l’évolution dynamique des conditions à la surface du modèle au gré des paléoconditions environnementales, et bien sûr la dynamique interne du système. La solution numérique de l’écoulement à densité variable des eaux souterraines est couplée à celle du transport de la salinité via la traduction perpétuelle de la salinité simulée en densité locale de l’eau. Les processus de transport de masse usuels sont considérés, incluant la diffusion, l’advection et la dispersion hydrodynamique du soluté d’intérêt. La salinité est globalement considérée sans représentation des processus géochimiques pouvant l’affecter.

Les résultats produits par ce modèle paléo-hydrogéologique numérique bidimensionnel sont exploités de plusieurs façons. Premièrement, ils sont valorisés tels quels en tant que scénario de reconstitution quantitative plausible de l’évolution postglaciaire de la dynamique d’écoulement des eaux souterraines et de la migration associée de la salinité dans le système aquifère régional à l’étude. Deuxièmement, ils sont analysés afin d’évaluer les rôles, l’importance et les effets des différents processus interactifs impliqués dans le transport souterrain de la salinité, désormais en contexte spatialisé (bidimensionnel). Troisièmement, ils sont examinés dans leur ensemble pour en dégager les caractéristiques principales propres aux phénomènes d’invasion du système aquifère régional par les eaux marines, de migration interne de la salinité souterraine, puis de lessivage du milieu souterrain.

La plausibilité des modèles, tant unidimensionnels que bidimensionnels, est vérifiée d’une part en s’assurant d’utiliser des paramètres basés sur des données de caractérisation appropriées et fiables puisées dans la littérature, et d’autre part en veillant à ce que l’état final (actuel) simulé par chacun des modèles hydrogéologiques numériques soit globalement compatible avec l’état présentement observé dans la région d’étude, principalement en termes de salinité de l’eau. Les modèles sont calés manuellement, en ajustant par essais et erreurs certains de leurs paramètres ayant de plus grandes incertitudes.

Deux environnements logiciels de simulation numérique sont utilisés pour réaliser les travaux. L'environnement de programmation R version 3.4.2 (R Core Team, 2017) est utilisé pour préparer les données d'entrée nécessaires à la construction de tous les modèles numériques de cette étude. Une majorité des modèles hydrogéologiques numériques sont préparés puis simulés avec le logiciel FEFLOW version 7.1 (Diersch, 2014). Certains modèles numériques unidimensionnels, toutefois, sont plutôt conçus et solutionnés dans R. De plus, des plugins de type "IFM" (de l'anglais "FEFLOW Interface Manager") en langage C++ sont programmés, parallèlement à la préparation des modèles numériques FEFLOW, principalement afin de gérer la mise à jour des paramètres transitoires du problème et d'extraire des résultats du modèle tout au long de la simulation. Les résultats des simulations numériques générés dans FEFLOW sont expressément exportés sous forme de fichiers de formats courants (ASCII, NetCDF) de façon à être plus facilement accessibles par R. L'analyse des résultats, incluant notamment la production de graphiques, est en très grande partie réalisée au moyen de programmes conçus en langage R. Seuls les résultats spatialisés pour l'ensemble du système modélisé sont analysés à même l'interface graphique de FEFLOW. La majorité des outils informatiques développés sont fournis dans l'Annexe A8.3.

3. Région d'étude

3.1 Localisation, physiographie et climat

La région d'étude, appelée Montérégie Est, se situe dans le Québec méridional, à l'est de l'Île de Montréal (Figure 40). La région d'étude comprend pratiquement tout le territoire couvert par les bassins versants des rivières Yamaska et Richelieu (ce dernier dans sa portion québécoise seulement alors qu'il s'étend en réalité aux États-Unis), soit une superficie totale d'environ 9 000 km^2. Nos travaux paléo-hydrogéologiques se concentrent toutefois sur le bassin versant de la rivière Yamaska.

La région est divisible en quatre contextes physiographiques (Figure 40) : trois contextes étendus se suivent, d'ouest en est (les Basses-terres du Saint-Laurent, le Piémont appalachien, puis les Hautes-terres appalachiennes) tandis qu'un quatrième contexte (composé des collines montérégiennes) perce ceux-ci à plusieurs endroits (Carrier *et al.*, 2013). Les Montérégiennes de la région d'étude, au nombre de sept, sont une suite de collines distantes d'environ 10 à 25 km et suivant un axe général ONO-ESE dont les altitudes maximales vont d'environ 200 à 550 m. L'élévation du sol au sein de chacun des trois contextes physiographiques varie de 10 à 60 m

dans les Basses-terres, de 60 à 110 m dans le Piémont, et de 110 m à 960 m dans les Hautes-terres (Carrier *et al.*, 2013). Le réseau hydrographique est beaucoup plus dense dans les Appalaches que dans les Basses-terres, en lien avec le relief plus accidenté de ce contexte. L'exutoire régional ultime du réseau de drainage de surface de la région (et donc des rivières majeures Yamaska et Richelieu) est le fleuve Saint-Laurent, dont la rive droite délimite le nord de la zone d'étude.

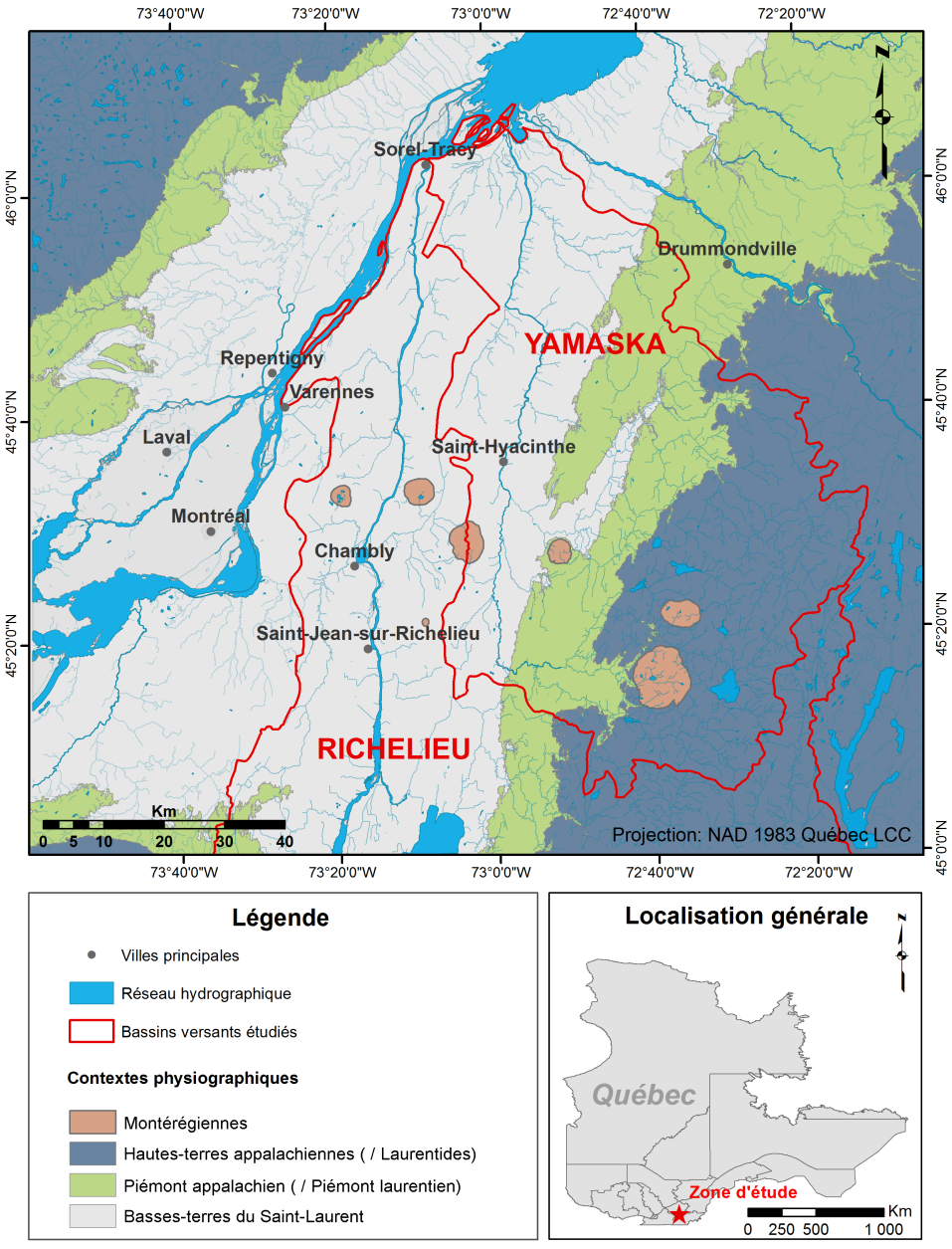


Figure 40 : Localisation de la région d'étude et ses contextes physiographiques. Basé sur données cartographiques tirées de Carrier *et al.* (2013).

Le climat de la région est de type continental humide avec, en termes de normales climatiques, des températures mensuelles moyennes passant de -12 °C en janvier à +21 °C en juillet (soit une température annuelle moyenne d'environ +6 °C) et des précipitations totales mensuelles variant assez peu, entre 50 à 100 mm en moyenne (pour un total annuel moyen d'environ 1100 mm/an) (Carrier *et al.*, 2013). Les précipitations se font principalement sous forme de pluie, sauf de décembre à janvier où c'est la forme nivale qui domine. Le ruissellement de surface ainsi que l'infiltration des eaux de surface dans le sol sont plus importants au printemps (de mars à avril), période qui concentre près de la moitié des flux totaux annuels, en lien avec la fonte des neiges accumulées au cours de l'hiver associée au dégel rapide du sous-sol (Carrier *et al.*, 2013).

3.2 Historique quaternaire régional

Au dernier maximum glaciaire (DMG), autour de 20 à 18 ka ^{14}C BP (26 à 21 ka cal BP) (Dyke, 2004; Peltier & Fairbanks, 2006; Stokes *et al.*, 2012; Peltier *et al.*, 2015), le front glaciaire de l'Inlandsis laurentidien s'écoulait tranquillement vers le sud-sud-est, au niveau de la région d'étude (Figure 41a). S'ensuivit une déglaciation rapide de la Vallée du Saint-Laurent dans son ensemble, d'abord liée au départ d'importants volumes de glace aux marges orientales de l'Inlandsis par vêlage d'icebergs destinés au Golfe du Saint-Laurent. Ces pertes de glace ont en effet induit un courant glaciaire majeur suivant l'axe nord-est de la Vallée du Saint-Laurent (Figure 41b), lequel a canalisé et accéléré les écoulements glaciaires vers et dans celui-ci, surtout à partir de l'actuel lac Saint-Pierre tout juste au nord-est de la région d'étude (Occhietti *et al.*, 2001b). Ce régime d'ablation accélérée, d'environ 15 à 12 ka ^{14}C BP (17 à 14 ka cal BP), en amincissant la glace dans sa zone d'influence, a progressivement isolé les glaces se trouvant au sud de l'axe du Saint-Laurent (Occhietti *et al.*, 2001b). Durant cette période, la vitesse de recul apparent de la marge glaciaire méridionale aurait été en moyenne d'environ 200 m/an ^{14}C dans la Vallée du Saint-Laurent, contre 250 m/an ^{14}C en contexte appalachien (Occhietti & Richard, 2003). Le glacier résiduel appalachien s'est ainsi trouvé de plus en plus indépendant du glacier principal évoluant séparément au nord de l'axe du Saint-Laurent (dit Dôme du Nouveau Québec), avec des écoulements divergents vers le Maine (É.-U.), au sud, et vers l'axe du Saint-Laurent, au nord (Figure 41b) (Occhietti *et al.*, 2001b).

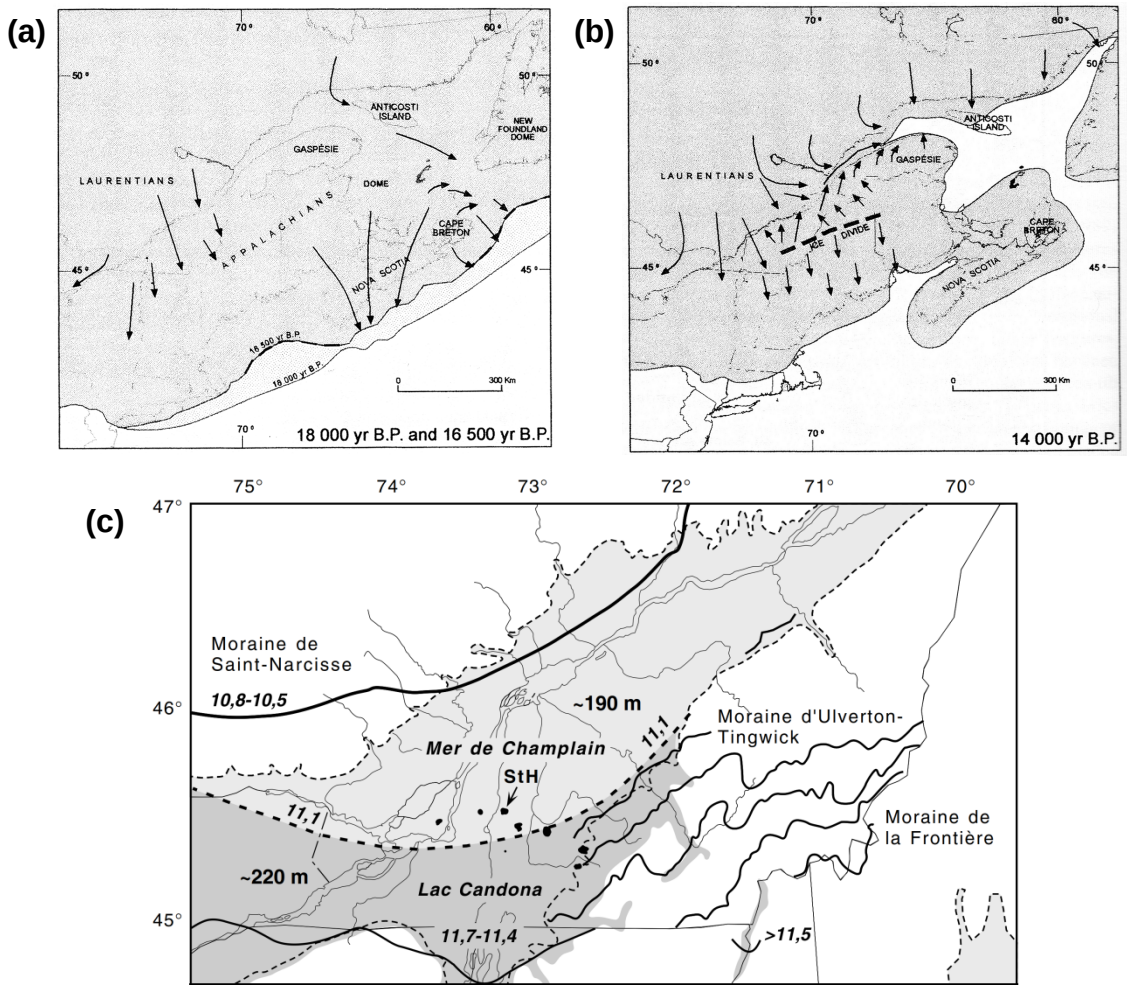


Figure 41 : Reconstitution paléogéographique de la Vallée du Saint-Laurent à différents stades clés pendant la dernière déglaciation. Les âges sont exprimés en ka ^{14}C BP conventionnels. (a) et (b) : Schémas tirés de Occhietti *et al.* (2001b) illustrant l'englacement de la vallée aux âges notés dans le coin inférieur gauche. (c) Schéma chronologique tiré de Occhietti & Richard (2003) où plusieurs limites clés sont tracées avec leur âge associé. 'StH' indique le mont Saint-Hilaire. Deux niveaux d'eau relatifs y sont également notés, en gras.

La déglaciation s'est encore accélérée durant le réchauffement de Bölling (12.5 – 12.2 ka ^{14}C BP, soit vers 14 ka cal BP) alors que le bilan de masse de l'Inlandsis laurentidien devenait fortement négatif ou, en d'autres mots, que le Dôme du Nouveau-Québec ne parvenait plus à compenser les pertes de glace associées au courant glaciaire et à la fonte accrue des glaces (Occhietti *et al.*, 2001b). L'accumulation d'eaux de fonte au front des glaciers a d'ailleurs mené à la formation de plusieurs lacs glaciaires dans la partie occidentale de la Vallée du Saint-Laurent (lacs Iroquois, Vermont et Memphrémagog), dont l'union éventuelle a formé le lac glaciaire Candona, lequel a occupé les secteurs déglacés de la partie sud de la région d'étude (principalement dans les

Appalaches) jusqu'à ce que la récession glaciaire ouvre finalement la partie occidentale de la Vallée du Saint-Laurent à la mer (Figure 41c) (Parent & Occhietti, 1988; Parent & Occhietti, 1999). L'invasion marine de la région d'étude par la Mer de Champlain a débuté vers 11 ka ^{14}C BP (13 ka cal BP) (Occhietti & Richard, 2003). La mer a dès lors inondé les terres d'élévations basses à intermédiaires, jusqu'à une limite marine diachronique correspondant à des élévations actuelles de paléorivages ou, autrement dit, de « niveaux d'eau relatifs » allant de 170 à 190 m dans la région d'étude (Parent & Occhietti, 1988).

Bien qu'il n'y ait pas encore de consensus en la matière, la salinité initiale des eaux de la Mer de Champlain apparaît plus vraisemblablement voisine de la salinité de l'océan atlantique, environ entre 25 et 35 g/L (Rodrigues, 1992; Guilbault, 1993). La salinité des eaux de la Mer de Champlain aurait éventuellement diminué au cours de l'épisode marin. L'interprétation des assemblages de foraminifères trouvés dans les sédiments de la région d'étude en termes de paléosalinités suggère en effet des phases marines tardives avec des salinités de 10 à 25 g/L, puis d'aussi peu que 2 à 10 g/L (Guilbault, 1993). L'épisode marin se serait terminé vers 9.5 à 9.8 ka ^{14}C BP (11 ka cal BP) (Occhietti *et al.*, 2001a). Le niveau d'eau relatif des eaux inondant la région d'étude à la toute fin de l'épisode marin aurait été d'environ 60 à 70 m, d'après les courbes de niveau d'eau relatif produites pour des régions situées un peu plus en aval dans la Vallée du Saint-Laurent, soit pour la région du lac Saint-Pierre (Lamarche, 2005; Pelletier, 2008), la région de Québec (Lamarche, 2011) et la rive sud de l'estuaire du Saint-Laurent (Dionne, 2001).

L'évolution post-Champlain du réseau de drainage de la partie occidentale de la Vallée du Saint-Laurent a débuté par le Lac à Lampsilis, épisode lacustre pendant lequel le niveau d'eau relatif a diminué assez linéairement depuis les 60–70 m initiaux pour terminer à environ 20 m vers 8 ka ^{14}C BP (9 ka cal BP) (Lamarche, 2011). L'évolution hydrographique s'est poursuivie sous la forme d'un système fluviatile étendu dénommé Proto-Saint-Laurent, dont les niveaux d'eau relatifs ont diminué lentement jusqu'à moins de 10 m tout en fluctuant néanmoins de plusieurs mètres au gré des variations climatiques (Lamarche, 2011).

L'évolution ultime du système fluviatile s'est complétée avec son rétrécissement jusqu'à correspondre à l'actuel fleuve Saint-Laurent, soit un niveau d'eau relatif contemporain d'environ 5 m (Pelletier, 2008; Lamarche, 2011).

3.3 Sédiments superficiels

On retrouve très peu de sédiments superficiels antérieurs à la dernière glaciation dans la région d'étude. En effet, les dépôts meubles présents ont essentiellement été amenés, créés ou déposés par l'Inlandsis laurentidien en mouvement, dans un premier temps, puis par les diverses inondations (glaciolacustres, marines, lacustres et fluviatiles), dans un second temps. Le bloc-diagramme conceptuel de la région d'étude présenté dans la Figure 42 montre les unités quaternaires principales dans leurs contextes physiographique et géologique.

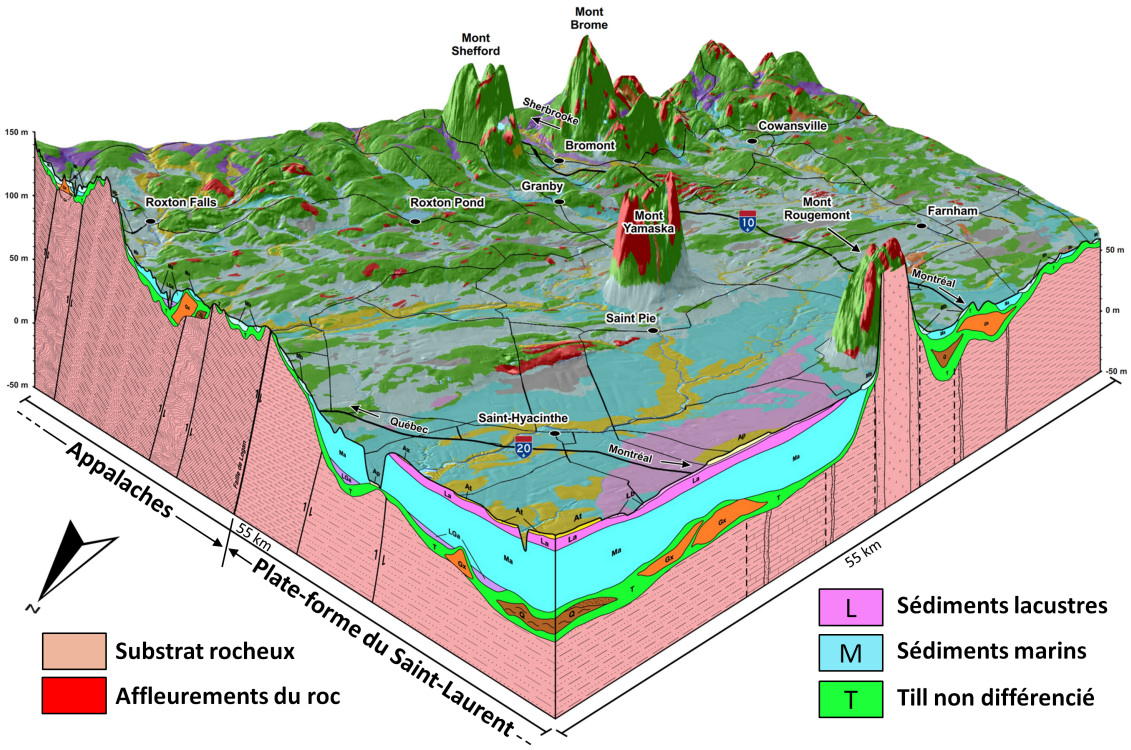


Figure 42 : Bloc-diagramme conceptuel de la région d'étude. Y sont représentés notamment la topographie, l'hydrostratigraphie des dépôts meubles, le socle rocheux et ses structures majeures et affleurements. Les provinces géologiques comprises dans la région d'étude sont également indiquées. Noter l'orientation particulière de la flèche indiquant le nord géographique. Exagération verticale de l'ordre de 100:1. Tiré de Carrier *et al.* (2013), avec légende simplifiée ajoutée.

La stratigraphie simplifiée des dépôts meubles recouvrant le socle rocheux, basée sur les travaux réalisés dans le cadre du projet PACES en Montérégie Est, s'organise comme suit (Carrier *et al.*, 2013; Dubé-Loubert *et al.*, 2014). Dans le secteur nord-ouest de la région, qui correspond au contexte physiographique des Basses-terres ainsi qu'à la zone d'eaux souterraines saumâtres

mentionnée précédemment (Figures 40 et 43), on trouve d'abord, à partir du socle rocheux, quelques mètres de sédiments glaciaires (tills) qui recouvrent directement le socle rocheux de façon relativement homogène par tout le secteur. Ensuite, il y a localement des accumulations de sédiments fluvioglaciaires (ex. eskers) qui peuvent parfois avoir balayé le till sous-jacent. Puis, dans les secteurs où la topographie est sous la limite marine, il y a en bien des endroits une accumulation de sédiments silto-argileux d'eau profonde qui ont été déposés tout au long de l'épisode d'invasion marine des Basses-terres par la Mer de Champlain — d'où leur appellation usuelle d'argiles de la Mer de Champlain. L'épaisseur des sédiments silto-argileux est plus importante aux endroits qui formaient des dépressions lors de l'épisode marin, notamment dans la partie nord-ouest de la région d'étude où l'épaisseur peut dépasser 30 m (au nord des Montérégiennes) (Figures 42 et 43). Il est d'intérêt de noter ici que les argiles de la Mer de Champlain sont en fait principalement constituées de farine glaciaire produite par l'action abrasive des glaciers et sont donc assez pauvres en minéraux proprement argileux (ex. phyllosilicates) (Leroueil *et al.*, 1983). Les argiles marines sont fréquemment recouvertes par une couche plus mince mais relativement continue d'argiles lacustres associées principalement au Lac à Lampsilis (Figure 42). Enfin, on trouve çà et là quelques accumulations mineures et discontinues de sédiments divers, alluviaux et organiques.

Différemment, dans les deux contextes physiographiques appalachiens du sud-est de la région d'étude, la couverture quaternaire est généralement très mince et principalement constituée de till (Figure 42), lequel a le plus souvent été remanié par l'action des vagues de la Mer de Champlain — dont les rivages atteignaient jadis ces élévations.

Puisque la présente étude se concentre sur le bassin versant de la rivière Yamaska et s'intéresse plus précisément à la présence d'eaux souterraines saumâtres dans le secteur nord-ouest de la région (Figure 43), l'unité quaternaire d'intérêt principal du point de vue hydrogéologique est donc tout naturellement l'unité de sédiments fins déposés par la Mer de Champlain. En effet, cette unité domine clairement les autres unités quaternaires de la séquence stratigraphique du secteur, d'abord en termes d'épaisseur (Figure 43), mais aussi de par sa très faible conductivité hydraulique qui, comme il sera détaillé plus loin, confère un rôle d'aquitard à cette unité silto-argileuse d'origine marine postglaciaire.

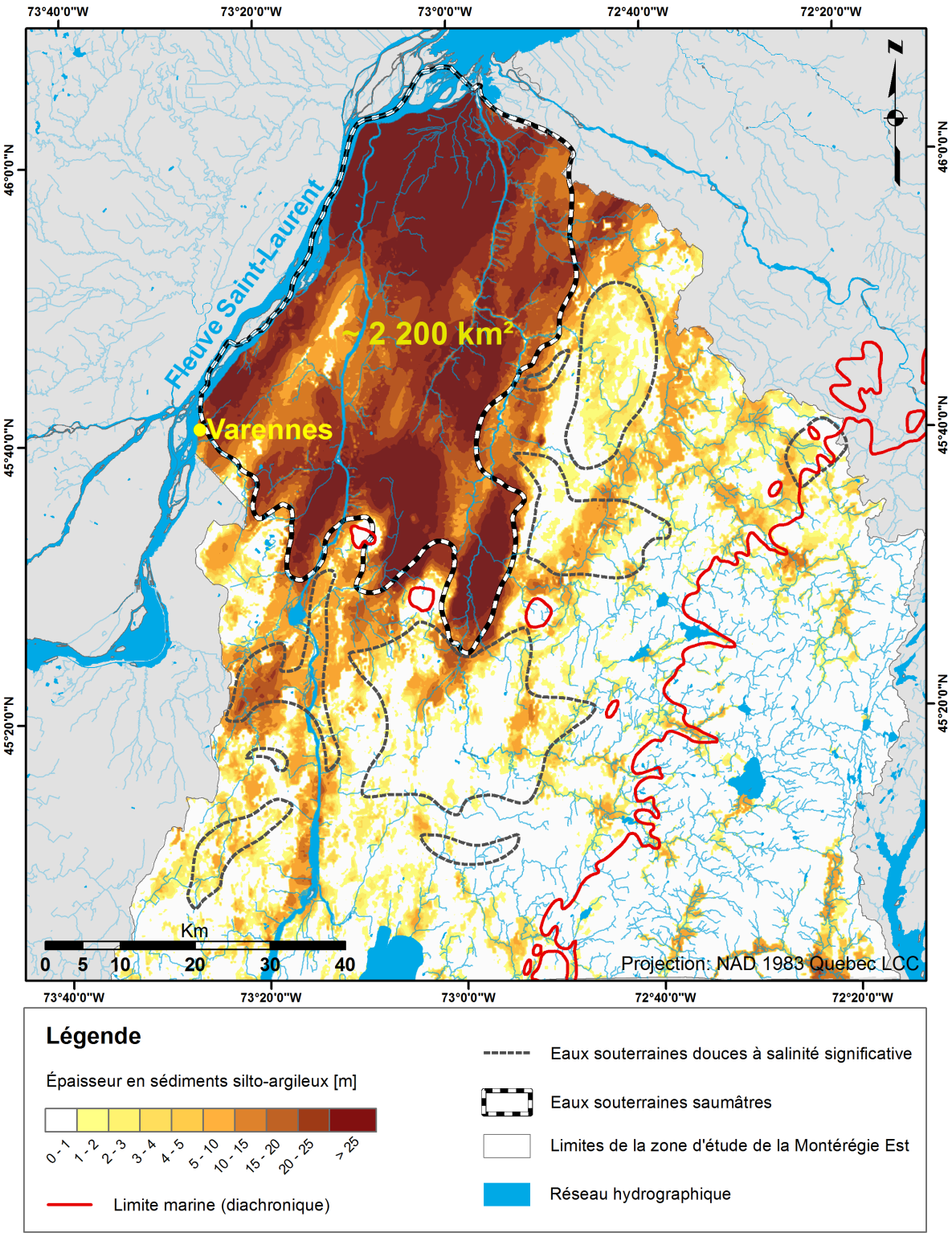


Figure 43 : Épaisseur actuelle en sédiments silto-argileux, délimitation de la zone d'eaux souterraines saumâtres, et limite marine diachronique de l'étendue de la Mer de Champlain, dans la région d'étude. Données tirées de Beaudry *et al.* (2011) et de Carrier *et al.* (2013).

3.4 Contexte géologique du roc

La région d'étude couvre deux provinces géologiques, la Plate-forme du Saint-Laurent (PFSL) et les Appalaches, séparées par un réseau complexe de failles de chevauchement appelé « ligne de Logan » (Globensky, 1987). De la même manière, la « faille de Brome-Bennett » sépare la province appalachienne en deux domaines tectonostratigraphiques principaux dans la région d'étude : la zone de Humber externe (à l'ouest de la faille de Bennett-Brome), qui correspond environ au contexte physiographique du Piémont, et la zone de Humber interne (à l'est de cette même faille), qui correspond d'assez près au contexte physiographique des Hautes-terres (Tremblay & Pinet, 2016). Les sept collines Montérégiennes de la région, constituées de roches ignées intrusives, percent pour certaines les formations rocheuses de la PFSL (monts Saint-Bruno, Saint-Hilaire, Saint-Grégoire, Rougemont et Yamaska) et pour d'autres celles des Appalaches (monts Shefford et Brome) (Thériault & Beauséjour, 2012; Carrier *et al.*, 2013).

Les formations rocheuses de la PFSL sont peu déformées et principalement constituées de shales, siltstones, dolomies, calcaires et grès. Les formations rocheuses des domaines appalachiens (externe puis interne) sont déformées de façon plus importante et partiellement métamorphisées, en lien avec les orogenèses taconique et acadienne qui ont abouti à la mise en place de ces « nappes de charriage à chevauchements répétés » constituant les actuelles Appalaches (Slivitzky & St-Julien, 1985; Carrier *et al.*, 2013). Les lithologies principales des roches appalachiennes sont en majorité semblables à celles de la PFSL, mais s'ajoutent toutefois des schistes et ardoises en raison du métamorphisme (Thériault & Beauséjour, 2012).

3.5 Contexte hydrogéologique

Les sédiments superficiels, essentiellement mis en place lors de la fin du dernier cycle glaciaire (voir Section 3.2), se traduisent en trois unités hydrostratigraphiques principales distinctes : les tills non remaniés et les argiles de la Mer de Champlain recouvrant le socle rocheux dans les Basses-terres, d'une part, et la mince couche de tills remaniés recouvrant le socle rocheux sur le Piémont appalachien. De façon générale, les tills non remaniés ont une conductivité hydraulique (K) assez faible, de l'ordre de 10^{-8} – 10^{-7} m/s, tandis que les tills remaniés ont une K accrue pouvant aller jusqu'à 10^{-4} m/s (Pontlevoy, 2004; Croteau, 2006). Les argiles de la Mer de Champlain ont, quant à elles, une K systématiquement faible, typiquement de l'ordre de 10^{-9} m/s sauf dans les premiers mètres de sa « croûte » superficielle où la K est accrue souvent jusqu'à 10^{-8} – 10^{-7} m/s

en raison de l'altération physique et chimique prolongée de ces sédiments depuis leur mise en place (Tavenas *et al.*, 1983; Lafleur *et al.*, 1987; Benabdallah, 2010). La porosité totale typique des tills est de l'ordre de 30 à 50 %, tandis que celle des argiles isolées de la surface est de l'ordre de 45 à 65 % (Desaulniers & Cherry, 1989; Benabdallah, 2010).

L'unité hydrostratigraphique des argiles de la Mer de Champlain, de par sa très faible K, sa forte épaisseur et sa continuité spatiale, impose des conditions captives au système aquifère rocheux sous-jacent dans la presque totalité de la partie nord-ouest de la région d'étude (voir Figure 43). Ailleurs dans la région, la couverture quaternaire étant généralement dominée par une mince couche de tills plus ou moins remaniés, le compartiment rocheux est nettement moins isolé hydrauliquement et donc le plus souvent en conditions semi-captives à libres. Les sédiments quaternaires de la région d'étude peuvent former en certains endroits des aquifères granulaires à bon potentiel d'exploitation, mais ne constituent pas des aquifères déterminants à l'échelle régionale en raison de leur petite dimension (Carrier *et al.*, 2013).

La « recharge » du système aquifère rocheux régional est naturellement plus importante là où la couverture quaternaire est relativement mince et perméable. La « recharge » au roc est estimée à près de 200 mm/an pour les Hautes-terres appalachiennes et les collines Montérégiennes, environ 100 mm/an pour le Piémont appalachien et la partie sud des Basses-terres du Saint-Laurent, contre < 15 mm/an presque partout dans la partie nord des Basses-terres — là où il y a la vaste zone d'eaux souterraines saumâtres (Carrier *et al.*, 2013).

On trouve plus de 35 000 puits résidentiels dans la région d'étude, dont environ 90 % sont des puits ouverts au roc, d'après la base de données du gouvernement du Québec dénommée *Système d'information hydrogéologique* (SIH). Les puits résidentiels sont bien répartis sur le territoire à l'étude puisqu'ils sont installés à même les terrains des résidents. Le SIH s'avère la source de données de premier intérêt dans le cadre de la caractérisation hydraulique des aquifères rocheux de la région, puisqu'y sont colligées toutes les informations nécessaires à l'estimation de la transmissivité (T) au niveau des puits. En effet, une majorité des puits résidentiels rapportés (55 %) ont fait l'objet d'essais de capacité spécifique bien documentés.

Des travaux de caractérisation hydraulique du système aquifère rocheux fracturé de la région d'étude réalisés récemment par les auteurs en assumant que ce système peut être traité en tant que milieu poreux équivalent montrent que sa conductivité hydraulique horizontale équivalente (notée K_{b}) — incluant les contributions des fractures mais aussi de la matrice rocheuse à la perméabilité totale — est principalement contrôlée par la perméabilité des fractures (surtout à faible profondeur), et qu'elle décroît rapidement avec la profondeur (Laurencelle & Lefebvre, 2018,

in prep.-b). En effet, les moyennes géométriques de K_b passent de 2×10^{-6} – 4×10^{-8} m/s (selon le contexte géologique) à proximité du toit du roc à aussi peu que 2×10^{-9} m/s à une profondeur de 100 m sous celui-ci (Figure 44). La plus faible K_b du roc dans les contextes appalachiens est probablement liée à une discontinuité accrue du réseau de fractures, ou au léger métamorphisme et aux déformations que ses roches ont subis (Carrier *et al.*, 2013). Ainsi, ces résultats montrent que la K_b du système aquifère rocheux régional est à toute fin pratique contrôlée essentiellement par la profondeur, et qu'il est donc peu important de documenter la variabilité spatiale horizontale de la K_b du roc à des échelles inférieures au contexte géologique (Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-b) (voir Chapitre 7). De plus, il est pertinent de souligner ici que cette étude s'intéressant au comportement général du système, il n'est pas jugé nécessaire de représenter les variabilités spatiales (hétérogénéités) de K_b autrement qu'en fonction de la profondeur dans le roc. Ainsi, des statistiques présentées dans la Figure 44, seuls les profils moyens (plus précisément celui de la Plate-forme du Saint-Laurent) sont utilisés dans l'étude.

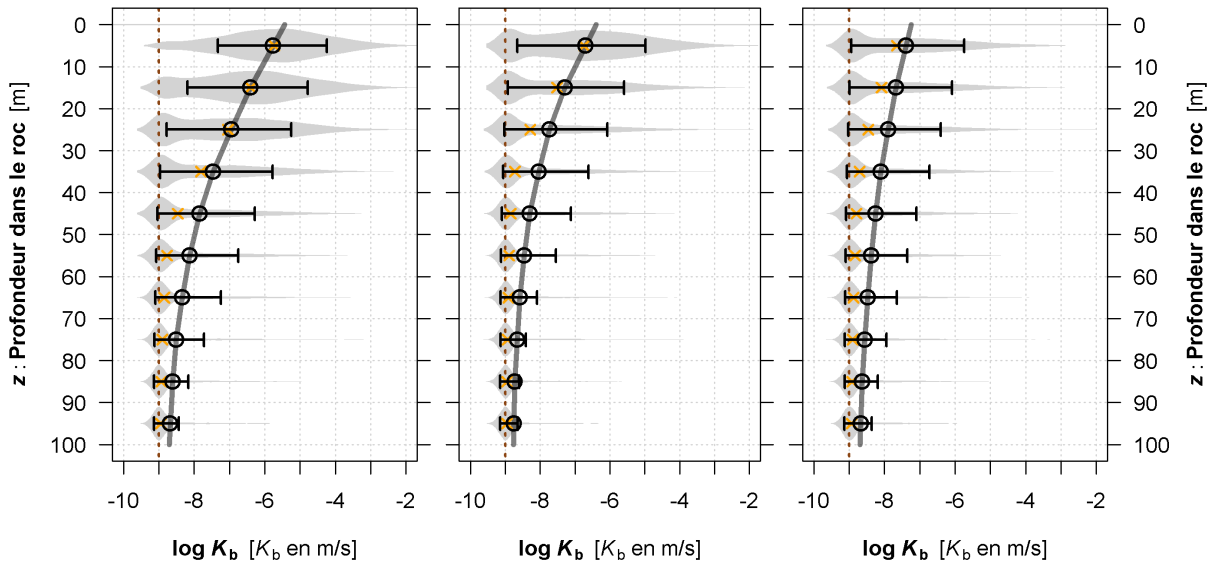


Figure 44 : Décroissance de la conductivité hydraulique horizontale équivalente (K_b) moyenne avec la profondeur dans le système aquifère rocheux fracturé régional de la Montérégie Est, par grand contexte géologique : (a) Plate-forme du Saint-Laurent ; (b) Appalaches (zone de Humber externe) ; (c) Appalaches (zone de Humber interne). Distributions lissées (surfaces grises), moyennes géométriques (ronds noirs), pseudo-écarts-types (traits noirs), et médianes (croix oranges) des valeurs de K_b dans chaque intervalle de profondeur de 10 m. La ligne verticale brun foncé indique la conductivité hydraulique moyenne considérée pour la matrice rocheuse. Adapté de Laurencelle & Lefebvre (2018, in prep.-b) (d'après la Figure 35 du Chapitre 7).

La porosité totale du roc, même à proximité de son toit, est très faible, soit de l'ordre de 1 – 5 %, sur la base d'estimations diverses réalisées pour des formations géologiques présentes dans la région d'étude, réparties de la proche-surface jusqu'à de grandes profondeurs (Croteau *et al.*, 2010; Carrier *et al.*, 2013; Larocque *et al.*, 2013; Tran Ngoc *et al.*, 2014).

3.6 Conditions d'écoulement souterrain actuelles

La piézométrie du système aquifère rocheux régional est fortement corrélée avec l'élévation de la surface du sol, dans l'ensemble ($R^2 \approx 0.99$), avec un écart moyen d'environ 3 m. Les tendances régionales dans la surface piézométrique du roc suggèrent des écoulements en direction nord-ouest (plus au nord) à nord-nord-ouest (plus au sud). À une échelle subrégionale, les gradients hydrauliques sont très faibles dans le secteur nord-ouest de la région — là même où siègent les eaux souterraines saumâtres et un épais aquitard argileux — jusqu'à la rivière Yamaska, à l'est. Une augmentation marquée du gradient hydraulique est observée entre la rivière Yamaska et la ligne de Logan, révélant une zone de résurgence préférentielle au niveau même de ce tronçon de la Yamaska (Carrier *et al.*, 2013) (voir la prolongation du trace de la « faille de Logan » qui sépare les provinces géologiques dans la Figure 42 plus haut). Les collines montérégiennes, en lien avec leur rôle de zones de recharge préférentielles, alimentent des écoulements divergeant de façon à peu près radiale vers l'encaissant environnant, entretenant ainsi une piézométrie légèrement rehaussée autour d'elles (Carrier *et al.*, 2013). Les gradients hydrauliques sont dans l'ensemble plus élevés dans les deux contextes appalachiens, étant donné le fort contrôle topographique exercé sur la piézométrie. Par conséquent, la piézométrie du système aquifère rocheux dans les Appalaches reproduit assez fidèlement l'alternance de vallées et collines propre à ces paysages. De plus, l'interprétation des données hydrogéochimiques acquises dans la région d'étude, tout comme les résultats de modélisations hydrogéologiques numériques simples en coupes verticales 2D, semblent indiquer que les Appalaches entretiendraient un système d'écoulement d'extension principalement locale (des hauts topographiques vers les vallées environnantes) avec tout de même une composante plus régionale pouvant faire résurgence jusque dans le Piémont, voire dans la rivière Yamaska (Carrier *et al.*, 2013; Laurencelle *et al.*, 2013; Beaudry *et al.*, 2018). Donc, à moins que l'aquifère rocheux ait une anisotropie hydraulique verticale extrême (K_h/K_v de l'ordre de 100:1 ou plus), il est peu vraisemblable que les Basses-terres réceptionnent des écoulements d'extension régionale en provenance des Hautes-terres appalachiennes (Laurencelle *et al.*, 2013) (voir Annexe A0.1).

4. Conceptualisation du problème

Comme pour toute étude hydrogéologique régionale appliquée à un système aquifère réel, le problème abordé ici doit nécessairement être simplifié afin de le rendre soluble. Toutefois, à la différence des études sur les conditions hydrogéologiques contemporaines où des données peuvent être obtenues pour toute la période investiguée, cette étude paléo-hydrogéologique ne dispose d'observations sur lesquelles caler les résultats simulés que pour le temps présent. En raison de cette impossibilité de contraindre les résultats simulés pour les périodes anciennes, alors qu'on cherche justement à obtenir une reconstitution plausible de l'évolution passée de l'état interne du système aquifère régional, il est optimal d'opter ici pour une représentation très simplifiée des différentes composantes du problème paléo-hydrogéologique. Les travaux visent ainsi à comprendre les processus impliqués dans l'invasion marine du système aquifère, plutôt qu'à tenter de reproduire les conditions exactes sous lesquelles cette invasion s'est produite.

La définition conceptuelle du problème paléo-hydrogéologique est abordée à travers les cinq grands thèmes suivants : la salinité des eaux de surface (marines ou lacustres), la période investiguée, la représentation du système aquifère régional, les paléoconditions entourant l'épisode d'incursion marine par la Mer de Champlain, et enfin les processus internes (souterrains) impliqués dans l'invasion du système aquifère régional par les eaux marines, d'une part, et dans son lessivage partiel, d'autre part.

La Figure 45 ci-dessous illustre l'ensemble des composantes du problème paléo-hydrogéologique sous la forme d'un modèle conceptuel comprenant, d'une part, une représentation dans l'espace du problème à l'étude et, d'autre part, une vue temporelle sur les trois principales paléoconditions environnementales ayant engendré les perturbations paléo-hydrogéologiques dans le système aquifère à l'étude. La Figure 45 montre, en outre, une partie de la notation symbolique utilisée dans l'étude. Le modèle conceptuel est inspiré en partie du « modèle hydrogéochimique conceptuel de l'évolution des eaux souterraines dans le système aquifère rocheux sédimentaire des Basses-Laurentides » — une région également située dans la Vallée du Saint-Laurent, au nord-ouest de Montréal, et similaire à notre région d'étude — proposé antérieurement par Cloutier *et al.* (2010, leur Fig. 10).

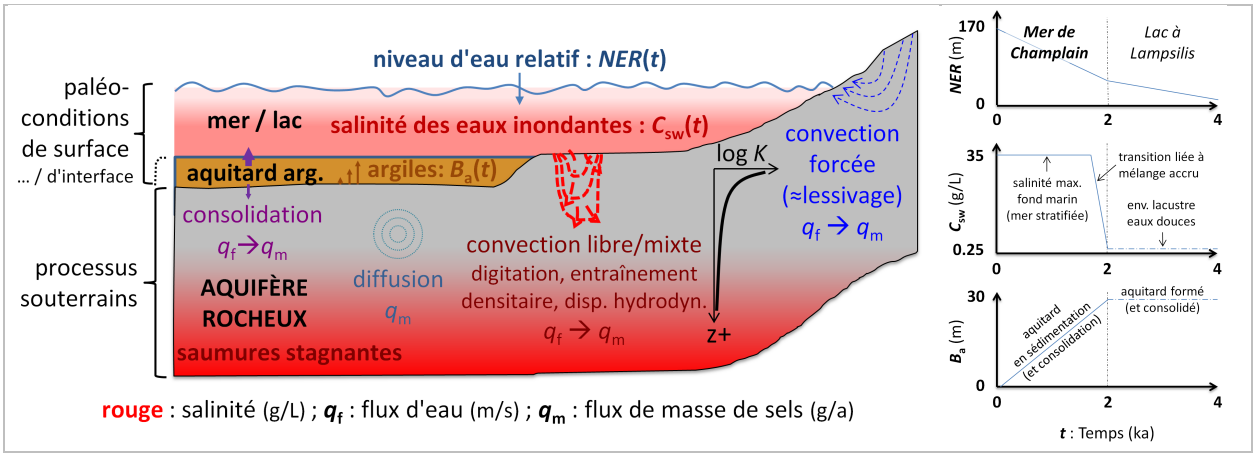


Figure 45 : Modèle conceptuel général du problème paléo-hydrogéologique à l'étude. Dans la partie droite : illustration des séries temporelles utilisées pour modéliser les paléoconditions transitoires principalement considérées dans cette étude, décrivant respectivement les évolutions du niveau d'eau relatif (*NER*), de salinité des eaux inondantes (C_{sw}) et de l'épaisseur de référence de l'aquitard argileux (B_a), dans la région d'étude. À noter : le schéma n'est pas à l'échelle.

4.1 La salinité et la densité des eaux

Puisque l'objet central de cette étude est la salinité des eaux, d'abord dans la sous-surface mais aussi dans les plans d'eau ayant jadis inondé la région d'étude, il est important de définir le concept même de salinité. Dans cette étude, la « salinité » est considérée équivalente à la concentration de matières dissoutes totales (MDT, ou TDS de l'anglais "total dissolved solids"), soit une concentration massique, et exprimée de préférence en g/L. La salinité est donc un soluté unique virtuel représentant la somme des solutés individuels réels présents dans l'eau. La salinité est, de plus, traitée comme un soluté conservatif. Les processus géochimiques pouvant dans la réalité modifier la composition ionique de l'eau, sa concentration de MDT, et donc sa salinité, sont délibérément ignorés. Ce choix conceptuel est associé à la supposition, jugée raisonnable, qu'une proportionnalité est maintenue entre la concentration de MDT et la concentration en chlore qui, elle, est typiquement considérée conservative (Domenico & Schwartz, 1998; Appelo & Postma, 2004). En termes de notation, le symbole choisi pour désigner la salinité en tant que variable est simplement « c », dans la suite du texte, rappelant ainsi son équivalence à une concentration de soluté unique.

Les concentrations de MDT les plus faibles actuellement observées dans la portion peu profonde du système aquifère rocheux régional (Beaudry *et al.*, 2018) sont utilisées afin de définir la salinité de référence pour les eaux douces ("freshwater"), soit c_{fw} = 0.25 g/L. Les eaux douces comprennent aussi les plans d'eau postglaciaires ayant inondé la région ainsi que les eaux de

recharge en conditions émergées. Cette salinité est considérée être la salinité minimale possible des eaux souterraines dans le système aquifère régional investigué.

La salinité maximale des eaux souterraines est définie de façon plus hypothétique en lien avec la représentation conceptuelle des saumures profondes (“deep brines”) élaborée plus loin dans la section, et fixée à c_{db} = 70 g/L, en s’inspirant des salinités observées dans une région voisine de notre région d’étude, Bécancour, à des profondeurs d’environ 1 km dans des formations rocheuses de la Plate-forme du Saint-Laurent (Tran Ngoc *et al.*, 2014, leur Fig. 9) (voir aussi Section 4.4.3). Entre ces deux extrêmes, une salinité de référence pour les eaux de la Mer de Champlain (“seawater”), notée c_{swref}, est considérée. Dans le scénario paléo-environnemental conceptuel finalement privilégié dans l’étude, la salinité du fond marin est considérée égale à la salinité moyenne des océans : $c_{\mathrm{swref}} = c_{\mathrm{ocean}}$ = 35 g/L (Millero *et al.*, 2008) (voir Section 4.4.1).

Le symbole c^* est également introduit pour représenter la salinité sous une forme relative (adimensionnelle), avec la définition générale suivante :

$$c^* = \frac{c - c_{\mathrm{fw}}}{c_{\mathrm{swref}} - c_{\mathrm{fw}}} \quad ; \quad 0 \leq c^* \leq 1 + \cdots$$

La salinité relative est définie par rapport à c_{swref} plutôt que c_{db} pour faciliter l’interprétation et la valorisation des résultats simulés plus loin. Les valeurs simulées de $c^* > 1$ sont donc liées à la présence de saumures. La valeur maximale de c^* possible dans une modélisation donnée dépend de ce fait des valeurs de référence effectivement choisies : $c^* \leq 1$ si aucunes saumures ne sont considérées dans le modèle, contre $c^* \leq (c_{\mathrm{db}} - c_{\mathrm{fw}})/(c_{\mathrm{swref}} - c_{\mathrm{fw}}) > 1$ si des saumures sont incluses dans le modèle.

Une relation de proportionnalité strictement linéaire est postulée entre la densité de l’eau (ρ) et sa salinité (c). Celle-ci est basée sur deux points de référence : $\rho(c_{\mathrm{fw}})$ = 1000 g/L, soit la densité typique des eaux douces d’origine pluviale, et $\rho(c_{\mathrm{ocean}})$ = 1025 g/L, soit la densité typique (valeur arrondie) des eaux de mer froides, de salinité standard et de faibles profondeurs (Voss & Souza, 1987; Morgan, 1994). La densité d’eaux souterraines de salinités supérieures à l’eau de mer est obtenue par simple extrapolation de cette relation linéaire, d’où la densité de référence des saumures, soit $\rho(c_{\mathrm{db}})$ = 1050 g/L. De façon générale, la densité de l’eau est donc liée à la salinité par la formule empirique suivante (Molson & Frind, 2014) :

$$\rho(c) = \rho(c_{\mathrm{fw}}) + \gamma c^*_{\mathrm{dens}}$$

où γ est une constante de proportionnalité (adimensionnelle) communément appelée « rapport de densité » (de l’anglais “density ratio”) définie par :

$$\gamma = \frac{\rho(c_{\mathrm{ocean}}) - \rho(c_{\mathrm{fw}})}{\rho(c_{\mathrm{fw}})} = \frac{1025 - 1000}{1000} = 0.025$$

et c^*_{dens} est une salinité relative établie spécifiquement par rapport à c_{ocean} (constante dans l'étude) plutôt que par c_{swref} (variable selon le scénario paléo-environnemental abordé). Le simulateur numérique utilisé dans cette étude, FEFLOW, exploite une telle relation linéaire entre ρ et c lors du calcul du coefficient de flottabilité ("buoyancy term") intervenant dans l'équation de Darcy à résoudre (Diersch, 2014).

4.2 La période investiguée

La période investiguée pour les fins de cette étude paléo-hydrogéologique est définie sur la base de l'historique quaternaire régional présenté précédemment (en Section 3.2). La période s'étend ainsi du tout début de l'incursion marine dans la région d'étude par la Mer de Champlain, estimée vers 13 ka cal BP (Occhietti & Richard, 2003), jusqu'à aujourd'hui, c'est-à-dire ~0 ka cal BP. Or, pour simplifier la notation du temps dans les modèles conceptuels puis numériques par la suite, la variable temps (t) est définie relativement à cet âge clé, de sorte que t = 0 ka correspond au début de l'incursion marine et t = 13 ka au temps présent (temps actuel). Le temps exprimé ainsi par la variable t devrait donc être en théorie interprété par rapport à la référence propre aux âges BP (de l'anglais "before present" : « avant le présent »), c'est-à-dire l'an 1950, mais considérant la longueur de la période investiguée, l'écart entre l'an 1950 et l'an actuel (2018) est jugé non significatif et donc négligé.

Le choix de débuter la période investiguée directement avec l'incursion marine champlainnienne suppose les hypothèses simplificatrices suivantes.

- Tout d'abord, l'épisode glaciolacustre du Lac Candona, précédant l'épisode d'incursion marine, est exclu de la période investiguée puisque jugé peu important pour les fins de la présente étude. Les motifs en sont que cet épisode glaciolacustre fut bref, soit de l'ordre de 0.1 ka (Parent & Occhietti, 1999), n'a connu que des eaux inondantes douces et déposé des sédiments fins de façon très discontinue avec des épaisseurs très souvent faibles dans la région d'étude, en particulier dans sa partie nord-ouest, dans le contexte des Basses-terres.
- Ensuite, la présence de glaciers à l'intérieur du territoire à l'étude à partir du début de l'incursion marine est négligée. Plusieurs éléments de la littérature appuient au moins en partie cette simplification du problème. Le retrait glaciaire au niveau de la région d'étude

fut très rapide à partir de l'incursion de la mer, avec un taux de retrait de l'ordre de 350 m/an ^{14}C (Occhietti & Richard, 2003). La durée de cohabitation entre le front glaciaire et la mer — c.-à-d. d'un environnement glaciomarin — dans la région d'étude fut donc assez courte. En effet, on peut l'estimer à quelque 0.2 ka, en divisant la distance séparant la pointe nord de la région d'étude (vers Sorel) du tracé du front glaciaire au début de l'incursion marine, évaluée à ~70 km par analyse visuelle de la Figure 41c, par le taux de retrait glaciaire. La mer est donc restée en contact avec le front glaciaire un certain temps dans la réalité (Occhietti & Richard, 2003), mais cette dynamique est néanmoins jugée secondaire pour les fins de la présente étude. En outre, on peut même considérer que l'invasion marine fut ~instantanée dans la partie sud de la région précédemment couverte par le Lac Candona.

- Enfin, la présence de pergélisol est négligée. Le paléoclimat lors de la déglaciation était chaud, même plus chaud que le climat d'aujourd'hui. Les pergélisols encore présents en terrain émergé au début de l'incursion marine (Dryas récent) ont donc dû dégeler relativement rapidement. Et dans l'éventualité où certaines portions de la proche-surface immergée furent encore gelées lors de l'incursion marine, un dégel efficace aura très probablement pu se faire en raison des conditions de température et de salinité du fond marin favorables au dégel.

Cette décision conceptuelle de considérer que glaciers et pergélisol sont absents de la région d'étude durant toute la période investiguée évite ainsi d'avoir à représenter ces composantes ainsi que leurs corollaires hydrogéologiques dans les modèles conceptuels et numériques.

4.3 Le système aquifère régional

Le système aquifère régional de la région d'étude est conceptualisé en deux compartiments. Le compartiment principal est l'aquifère rocheux (AR), c'est-à-dire plus précisément le système aquifère rocheux fracturé régional. Le second compartiment est l'aquitard argileux (AA), qui correspond à l'unité stratigraphique des sédiments fins déposés par la Mer de Champlain (argiles et silts), telle que définie en Section 3.3. L'expression « argiles de la Mer de Champlain » est utilisée par endroits dans le texte pour éviter l'expression plus juste mais complexe de « sédiments de granulométrie silto-argileuse déposés par la Mer de Champlain ». Le rôle d'aquifère régional est attribué à l'AR en raison de sa conductivité hydraulique relativement élevée en proche-surface, de la continuité latérale du roc fracturé perméable et du volume très important de la zone active

d'écoulement de l'eau souterraine dans l'aquifère rocheux fracturé. L'AA, différemment, est associé à un rôle d'aquitard subrégional en raison de sa très faible conductivité hydraulique.

4.3.1 Une géométrie simplifiée

Le modèle conceptuel du système aquifère régional peut d'abord être décrit par sa géométrie, nécessairement simplifiée par rapport à la géométrie du système réel : ainsi, les fines variations spatiales de la surface du sol comme du roc ne sont pas considérées. Il en va de même pour l'évolution temporelle de la topographie du sol, notamment liée à l'évolution du réseau hydrographique et à l'incision des sédiments quaternaires voire du roc superficiel par les cours d'eau majeurs, et à l'érosion et la remobilisation des sédiments en général. En fait, seule la formation de l'AA est considérée, en termes de composante à géométrie changeante.

La géométrie retenue pour définir le modèle conceptuel en coupe verticale (2Dxz) est inspirée des caractéristiques géométriques du système réel (présentées plus haut dans la Section 3) de part et d'autre de la limite entre les Basses-terres du Saint-Laurent et le Piémont appalachien (voir Figures 40 et 43). La coupe conceptuelle 2Dxz inclut ainsi, dans sa moitié gauche, une portion de la zone d'intérêt prioritaire où siègent des eaux souterraines saumâtres captives sous un AA épais, et, dans sa moitié droite, une portion du système aquifère régional exempte d'AA et en conditions libres. Elle comprend un bassin plat aux plus basses élévations (moitié gauche, nord-ouest), où viennent s'accumuler les argiles pour former l'AA, et un relief simpliste de type colline (moitié droite, sud-est) représentant une vaste zone de recharge uniforme en conditions libres. La moitié droite reproduit ainsi de façon schématique la topographie générale du Piémont appalachien.

4.3.2 L'aquifère rocheux (AR)

L'hypothèse première est formulée que l'AR peut, à l'échelle régionale, être représenté par un milieu poreux équivalent. Cette simplification, qui apparaît essentielle étant donné la taille du système à l'étude, est jugée raisonnable à l'échelle régionale. D'une part, elle est supportée par plusieurs monographies, recherches théoriques et appliquées (Long *et al.*, 1982; Oda, 1986; ex. Cook, 2003; Singhal & Gupta, 2010). D'autre part, comme mentionné plus haut, des travaux récents de caractérisation hydraulique de l'AR de la région d'étude montrent que la variabilité spatiale régionale de la conductivité hydraulique (K) de l'AR peut être décrite de façon cohérente

et efficace via la notion de K équivalente (“bulk K”, mais néanmoins notée « K » dans la suite du texte) découlant de l’hypothèse de milieu poreux équivalent (Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-b). Ces mêmes travaux ont aussi montré que la K de l’AR dans la région d’étude décroît rapidement avec la profondeur, se réduisant en moyenne à environ 2×10^{-9} m/s à une profondeur de 100 m sous le toit du roc (voir Section 3.5). Le contrôle des fractures sur la K s’amenuise donc avec la profondeur, la K devenant de plus en plus contrôlée par la faible K de la matrice rocheuse (Laurencelle & Lefebvre, 2018, in prep.-b) (voir Section 4.3.1 du Chapitre 7).

À la lumière des résultats de ces travaux, la K de l’AR dans le modèle conceptuel est ainsi définie par le biais d’une formule non linéaire variant en fonction de la profondeur dans l’AR et ajustée à la tendance statistique décroissante décrite dans nos travaux précédents pour le contexte de la Plate-forme du Saint-Laurent — contexte géologique prioritaire de l’actuel problème puisque c’est là où se trouve la zone saumâtre. La formule générale utilisée est la suivante :

$$\log K\,(d) = \log K_{\min} + (\log K_{\max} - \log K_{\min}) * e^{-\lambda d'} \tag{34}$$

où $d' = \max(d - d_0, 0)$ est une profondeur transformée permettant de considérer une portion supérieure d’AR à K constante (non décroissante) et maximale $K(d \leq d_0) = K_{\max}$, avec d_0 la profondeur seuil à partir de laquelle la décroissance de K débute ; où $K_{\max}$ est la K maximale, $K_{\min}$ est la K minimale (asymptotique), et λ est un paramètre contrôlant le taux de décroissance de K. Les valeurs optimisées des paramètres de la formule après ajustement sont : $K_{\max}$ = 1.00×10^{-6} m/s, $K_{\min}$ = 1.00×10^{-9} m/s, λ = 0.0256 m^{-1}, et d_0 = 10.0 m : les logarithmes appliqués ici sont en base 10.

La K de l’AR est, au besoin, simplifiée davantage en la stipulant uniforme pour tout le compartiment rocheux modélisé. La valeur constante et unique utilisée alors est définie à partir de la valeur maximale du cas décroissant, soit $K_{\text{cst}} = K_{\max}$ et donc fixée à 1.00×10^{-6} m/s.

De façon similaire, une porosité uniforme est assumée pour l’entièreté de l’AR conceptualisé. La mobilité inhomogène de l’eau dans des milieux fracturés, telle que bien résumée par le concept de la double porosité, n’est pas considérée ici. En d’autres mots, le rôle capacitif de la porosité immobile (fractures impasses et porosité matricielle) et son effet potentiel de « retardement » dans le transport de la salinité sont sciemment négligés. Un seul type de porosité est considéré, si bien que les porosités totale (n_{tot}) et mobile ou effective (n_{eff}) se confondent. La valeur de référence choisie pour la porosité de l’AR est de n_{tot} = 0.01, une valeur arrondie à l’ordre de grandeur et basée sur les valeurs de n_{eff} rapportées dans divers travaux de caractérisation de formations

rocheuses présentes dans la région d'étude, principalement dans le contexte de la Plate-forme du Saint-Laurent (Tran Ngoc *et al.*, 2011; Carrier *et al.*, 2013). La n_{eff} de référence ainsi définie pour l'AR est sensiblement plus faible que les valeurs trouvées dans la littérature, et ce intentionnellement, puisque le volume de pores dans l'AR doit correspondre environ à celui de la porosité bien connectée pour bien représenter l'écoulement préférentiel dans le réseau de fractures.

Une valeur uniforme de diffusivité effective de $D_{\mathrm{e.AR}}$ = 1×10^{-11} m^2/s est considérée pour l'AR. Cette valeur a été obtenue de la façon suivante. D'abord, une tortuosité représentative de l'AR (τ_{AR}) a été calculée à partir d'une formule empirique reliant la tortuosité de différentes roches sédimentaires (gréseuses ou calcareuses) à leur porosité : $\tau_{\mathrm{AR}} \sim {n_{\mathrm{AR}}}^{1.2}$ (Boving & Grathwohl, 2001). Puis, considérant le coefficient de diffusion moléculaire de l'ion chlore (D_0 ≈ 2×10^{-9} m^2/s), une valeur brute de diffusivité effective du roc a été calculée : $D_{\mathrm{e.AR}} \approx \tau_{\mathrm{AR}} D_0 = 8\times10^{-12}$ m^2/s. Enfin, la valeur brute précédente a été arrondie à l'ordre de grandeur supérieur — dans le but de tenir compte du fait que la distribution des porosités mesurées du roc s'étale en partie vers des valeurs supérieures à n_{AR} = 0.01 (voir Tran Ngoc *et al.*, 2011) — d'où : $D_{\mathrm{e.AR}} \sim 1\times10^{-11}$ m^2/s.

Un coefficient d'emmagasinement spécifique (S_s) uniforme est également assumé à l'échelle de l'AR entier. Une valeur constante de S_s = 10^{-5} m^{-1} est choisie sur la base de la gamme de valeurs typiques de la littérature pour un roc fissuré (Freeze & Cherry, 1977; Duffield, 2016a).

L'anisotropie hydraulique de l'AR est sciemment négligée (K_h/K_v = 1:1). Cette simplification arbitraire est en partie justifiable par le fait que les rapports d'anisotropie verticale rapportés dans des études hydrogéologiques s'intéressant à des formations rocheuses comparables à celles de notre région d'étude (p. ex. shales) sont typiquement modestes (K_h/K_v ≤ 10:1), bien que non négligeables de façon générale (Sykes *et al.*, 2011).

En somme, les hétérogénéités locales de l'AR ne sont pas considérées, peu importe la propriété hydraulique dont il est question. Tel qu'expliqué précédemment, ce choix se justifie par le fait que nous nous intéressons au comportement général du système.

Par ailleurs, l'épaisseur de l'AR conceptualisé, ou autrement dit la profondeur maximale de l'AR modélisé, est établie à une valeur uniforme de 1000 m. Le choix de cette valeur se justifie par le fait que les écoulements souterrains sont nécessairement très lents au-delà de quelques centaines de mètres de profondeur dans l'AR, en raison de la décroissance rapide de K avec la profondeur précisée précédemment (Laurencelle *et al.*, 2013) (voir Annexe A0.1).

4.3.3 L'aquitard argileux (AA)

L'hydrostratigraphie considérée dans le modèle conceptuel est grandement simplifiée. La seule unité stratigraphique représentée est celle des argiles de la Mer de Champlain. Les autres types de dépôts meubles couvrant l'AR (tills, eskers, etc.) sont tous négligés. Cette simplification est justifiée par le fait que les dépôts meubles autres que l'AA ont, en moyenne dans la région, des porosités et des épaisseurs significativement inférieures à celles de l'AA (voir Section 3.3). Plus précisément, on choisit de négliger aussi le till malgré son épaisseur et sa continuité notables parce qu'il y a plusieurs indications comme quoi il y aurait à l'échelle de la région une recharge active, bien que modérée, à travers cette unité quaternaire, laquelle ne peut donc pas jouer un rôle d' aquitard (Carrier *et al.*, 2013). En outre, la K du till est considérée voisine de celle du roc.

Il est assumé que les fines constituant l'AA actuel ont été déposées entièrement pendant l'épisode d'incursion marine (Mer de Champlain). Les études géologiques des sédiments quaternaires dans la région d'étude et ses environs montrent en effet que les autres dépôts de granulométrie fine (p.ex. les fines du Lac à Lampsilis) ont des épaisseurs peu significatives en plus d'être nettement moins continus que les argiles de la Mer de Champlain (ex. Ross, 2004; Godbout, 2013). De plus, la seule zone d'accumulation considérée pour ces argiles marines est la partie nord-ouest de la région d'étude (à l'ouest du Piémont) correspondant à la zone saumâtre. Les accumulations locales d'argiles dans les vallées du Piémont ne sont donc pas prises en compte.

La variabilité spatiale interne des propriétés hydrauliques de l'AA n'est pas considérée dans la plupart des modélisations de cette étude, sauf dans la Section 5.C où à la fois la K et la n_{tot} de l'AA varient dans l'espace et dans le temps. Par contre, les phénomènes d'altération-fissuration ou d'érosion de la partie supérieure de l'AA ne sont considérés en aucun cas (Lafleur *et al.*, 1987; O'Shaughnessy & Garga, 1994). Les hétérogénéités locales de l'AA ne sont pas considérées non plus, que ce soit en termes de composition et de granulométrie des sédiments, de K, de S_{s}, de n_{tot} ou de quelque autre propriété hydraulique. Cette hypothèse d'homogénéité de l'AA, invoquée dans la majorité des modélisations de cette étude, est peu restrictive puisque les argiles de la Mer de Champlain ont été décrites dans plusieurs études comme étant plutôt homogènes en termes de propriétés hydrauliques actuelles — c.-à-d. une fois la sédimentation et la consolidation de l'AA terminées (Desaulniers & Cherry, 1989; ex. Benabdallah, 2010). De plus, l'AA est considéré isotrope, sur la base de travaux de caractérisation géotechnique et hydrogéologique des argiles de la Mer de Champlain (Tavenas *et al.*, 1983; Leroueil *et al.*, 1990; Benabdallah, 2010). Ainsi, la porosité actuelle de référence pour l'AA est établie à $n_{\mathrm{tot.act}}$ = 0.64 d'après la porosité moyenne

des argiles du site de Varennes — situé dans la zone saumâtre au nord-ouest de la région d'étude — estimée puis rapportée par Desaulniers & Cherry (1989). De la même façon, une conductivité hydraulique de référence pour l'AA est établie à K_{AA} = 1×10^{-9} m/s (Tavenas *et al.*, 1983). Quant à la diffusivité effective au sein de l'AA, elle est fixée à $D_{\mathrm{e.AA}}$ = 1×10^{-9} m^2/s. Cette valeur de $D_{\mathrm{e.AA}}$ a été obtenue en multipliant le coefficient de diffusion moléculaire de l'ion chlore mentionné précédemment (D_0 ≈ 2×10^{-9} m^2/s) par la tortuosité dans l'AA ($\tau_{\mathrm{AA}} = D_{\mathrm{e.AA}}/D_0 \implies D_{\mathrm{e.AA}} = D_0 \cdot \tau_{\mathrm{AA}}$), estimée par le biais d'une formule empirique établie spécialement pour des sédiments fins non lithifiés : $\tau_{\mathrm{AA}} = \left[1 - \ln\left(n_{\mathrm{AA}}^2\right)\right]^{-1}$ ≈ 0.5 (Boudreau, 1996).

En outre, les variations spatiales dans l'épaisseur de l'AA réel sont drastiquement simplifiées, c.-à-d. lissées, dans la conceptualisation de l'AA, de façon à obtenir une géométrie plus générique. Une épaisseur typique cible de 30 m pour l'AA pleinement formé est posée, basée sur une appréciation arbitraire de l'épaisseur moyenne de la couche d'argiles marines dans la partie nord-ouest de la région d'étude (Figure 43) (Carrier *et al.*, 2013).

4.4 Les paléoconditions

La modélisation conceptuelle des paléoconditions a pour but de constituer un scénario paléo-environnemental représentatif pour la région d'étude. Un tel exercice exige de profondes simplifications par rapport à l'inévitable complexité spatiotemporelle des paléoconditions réelles. Nous partons de l'hypothèse que ce sont surtout les conditions hydrauliques, chimiques et de sédimentation à la surface du système aquifère régional qui ont contrôlé son évolution paléo-hydrogéologique. Divers phénomènes sont donc exclus (voir textes des sous-sections pour plus de détails). Cette reconstitution est dans son ensemble étroitement basée sur l'historique quaternaire régional abordé plus tôt (Section 3.2).

4.4.1 Conditions de surface

Deux paléoconditions de surface sont reconstituées schématiquement pour les fins de l'étude : l'évolution du niveau d'eau relatif et celle de la salinité des eaux inondantes. Les données disponibles ne permettent pas de considérer la variabilité spatiale de ces paléoconditions de surface. Celles-ci sont donc être décrites sous forme de séries temporelles.

Niveau d'eau relatif

Représentation symbolique : $NER(t)$

Une première série temporelle est construite pour modéliser l'évolution du niveau d'eau relatif (NER) dans la région d'étude pendant la période investiguée. La série temporelle a la forme d'une ligne brisée joignant les valeurs clés présentées dans le Tableau 19 ci-après. Le NER est exprimé par rapport au zéro géodésique — défini par le niveau moyen des mers actuel — et non par rapport au niveau d'eau actuel du fleuve en région. C'est ce qui explique que le NER actuel ne soit pas égal à 0 m, mais plutôt 5 m, c'est-à-dire le niveau actuel du fleuve Saint-Laurent au nord de la région d'étude relativement au zéro géodésique. La dérivée temporelle de $NER(t)$ est donc discontinue aux temps clés, donc aux changements de pente. Un seul scénario d'évolution du NER est ainsi défini (voir Figure 45). Ces niveaux d'eau relatifs sont traduits, plus loin, en charges hydrauliques (h) venant s'imposer localement au toit de l'AR, en considérant la densité de l'eau dans le calcul des h, densité qui est fonction de la salinité des eaux inondantes décrite plus loin. Par contre, il convient de noter que l'inclinaison de la croûte terrestre à l'échelle de la région d'étude de même que l'évolution temporelle de celle-ci sont négligées dans notre conceptualisation. Aucun redressement du système aquifère régional ni aucune modification du vecteur de la force de gravité ($\vec{g}$) au cours du temps ne sont, en effet, considérés. Le $NER(t)$, tel que conceptualisé, interagit donc avec un modèle ancré au référentiel actuel (zéro géodésique) en tout point.

Tableau 19 : Valeurs clés pour décrire l'évolution du niveau d'eau relatif (NER) régional sous la forme d'une série temporelle. Les plans d'eau débutent aux temps / âges clés spécifiés.

Temps du modèle (t : ka)	Âge calendaire (ka cal BP)	Niveau d'eau relatif (m) [plan d'eau]	Source des âges et des valeurs de NER
0	13	175 [Mer de Champlain]	Parent & Occhietti (1988)
2	11	65 [Lac à Lampsilis]	Lamarche (2011) et Pelletier (2008)
4	9	30 [Proto-Saint-Laurent]	Lamarche (2011) et Pelletier (2008)
13	0	5 [Fleuve Saint-Laurent]	Lamarche (2011)

Salinité des eaux inondantes

Représentation symbolique : $C_{\mathrm{sw}}(t)$ pendant l'épisode marin ; c_{fw} autrement

Une deuxième série temporelle est construite pour modéliser l'évolution de la salinité des eaux inondantes marines (C_{sw}) dans la région d'étude spécifiquement pendant l'épisode marin. Tout d'abord, il est considéré que la salinité d'intérêt pour les zones inondées par la Mer de Champlain est celle du fond marin et ce, sur toute la durée de l'épisode marin. Ce choix conceptuel repose sur l'hypothèse d'une Mer de Champlain bien stratifiée en termes de salinité, ce qui est appuyé par plusieurs faits. D'une part, la littérature montre que même en présence de flux d'eau de fonte importants, ces eaux de fonte vont typiquement flotter sur les eaux marines plutôt que de se mélanger avec elles, en raison de leur différence de densité (Salcedo-Castro *et al.*, 2011). D'autre part, nombre d'études ont proposé ou utilisé une schématisation stratifiée de la salinité des eaux de la Mer de Champlain (Quigley, 1980; Hillaire-Marcel, 1981; Hillaire-Marcel, 1988; Wassenaar *et al.*, 1988; Rodrigues, 1992; Guilbault, 1993; Benabdallah, 2010).

Ensuite, un choix semi-arbitraire est fait pour définir les valeurs clés de la salinité du fond marin pendant l'épisode marin. Il est assumé que la salinité initiale des eaux inondantes était élevée et proche de la salinité moyenne des océans. Le scénario finalement privilégié pour décrire C_{sw}, d'ailleurs, est basé sur la salinité moyenne des océans : $C_{\mathrm{sw}}(t = 0\ \mathrm{ka})$ = c_{ocean} = 35 g/L. D'autres scénarios de salinité initiale sont néanmoins considérés dans la présente étude, afin d'en évaluer la probabilité. La gamme de valeurs initialement privilégiée dans l'étude, 20 g/L ≤ $C_{\mathrm{sw}}(t = 0\ \mathrm{ka})$ ≤ 35 g/L, est compatible avec les salinités maximales de la Mer de Champlain estimées par plusieurs travaux (Rodrigues, 1992; ex. Guilbault, 1993). Elle vient par contre s'opposer à l'hypothèse également présente dans la littérature selon laquelle la Mer de Champlain aurait eu une salinité environ trois fois inférieure à la salinité moyenne des océans (ex. Desaulniers & Cherry, 1989; Cloutier *et al.*, 2010). C'est pourquoi un scénario avec $C_{\mathrm{sw}}(t = 0\ \mathrm{ka})$ = 12 g/L est tout de même testé dans notre étude. La fin de la série temporelle est arbitrairement définie par la valeur clé $C_{\mathrm{sw}}(t = 2\ \mathrm{ka})$ = c_{fw} = 0.25 g/L, de sorte que la salinité atteinte à ce moment soit identique à celle qui définit l'épisode lacustre suivant (Lac à Lampsilis : eaux douces). Entre ces deux temps et valeurs de salinité clés, un point pivot (unique) est inséré, avec une salinité égale à la salinité initiale et un temps seuil arbitraire t_{swchg} de préférence tardif — à être estimé plus loin lors du calage de chaque modèle numérique. La reconstitution de l'évolution de la C_{sw} (voir Figure 45) se résume donc en deux sous-périodes : une première (de 0 ka à t_{swchg}) durant laquelle la salinité du fond marin demeure maximale et égale à c_{swref} ; et une seconde (de t_{swchg} à 2 ka) tout

au long de laquelle la salinité du fond marin diminue linéairement de c_{swref} jusqu'à c_{fw}. Le scénario finalement privilégié dans cette étude pour décrire l'évolution temporelle de la salinité des eaux inondantes débute donc par : $C_{\mathrm{sw}}(0\ \mathrm{ka})$ = 35 g/L = la c_{swref} privilégiée (voir Section 4.1).

La considération d'un temps seuil à partir duquel la salinité du fond marin commence à diminuer est justifiée comme suit. D'une part, à partir d'un certain moment (symbolisé ici par t_{swchg}), le NER est devenu insuffisant pour que le fond marin continue d'être protégé du brassage causé par les fortes tempêtes et ensuite par les marées. La colonne d'eau commence alors à se mélanger, ce qui défait peu à peu la stratification densitaire antérieure. D'autre part, un rétrécissement remarquable existe dans la topographie de la Vallée du Saint-Laurent, appelé « seuil de Québec » ou « détroit de Québec » (Occhietti *et al.*, 2001a; Dolgopolova & Isupova, 2011; Lamarche, 2011). À partir d'un moment encore peu précis dans la littérature mais tardif dans l'épisode marin, la diminution de la section d'écoulement de la Mer de Champlain, associée à la chute du NER, est telle que son approvisionnement en eaux salées par la Mer de Goldthwait est progressivement compromis, jusqu'à cesser. C'est l'effet de ces deux processus hydrodynamiques que la partie tardive de la série temporelle, $C_{\mathrm{sw}}\left(t_{\mathrm{swchg}} < t < 2\ \mathrm{ka}\right)$, vient modéliser de façon schématique.

En outre, il est important de mentionner que cette définition de $C_{\mathrm{sw}}(t)$ ne considère pas du tout la dépendance spatiale de la salinité au fond marin, bien que la littérature démontre que même quand une forte stratification de la salinité s'installe dans une mer, ses eaux peu profondes situées plus près des berges devraient être moins salées, voire douces, toujours en lien avec le phénomène de stratification des eaux mais aussi souvent à cause des apports en eaux douces venant du ruissellement des terres émergées ou de la fonte glaciaire (ex. Wassenaar *et al.*, 1988; Rodrigues, 1992). Cette variabilité spatiale est volontairement ignorée dans la présente conceptualisation parce que l'application de concepts de stratification et de spatialisation de la salinité du fond marin compliquerait grandement la description quantitative du problème sans apporter de nuance essentielle à la représentation des processus et phénomènes principaux. Ainsi, la salinité des eaux inondant le toit du système aquifère régional pendant l'épisode marin est assumée égale à $C_{\mathrm{sw}}(t)$ peu importe la hauteur locale des eaux inondantes.

Enfin, il est considéré que seul l'épisode d'incursion marine impose des eaux inondantes de salinités supérieures à celles des eaux douces, de sorte que $C_{\mathrm{sw}}(t \geq 2\ \mathrm{ka}) = c_{\mathrm{fw}}$ = 0.250 g/L (voir Figure 45). C'est ainsi que la salinité du Lac à Lampsilis, du Proto-Saint-Laurent, puis ultimement du fleuve Saint-Laurent est définie égale à celle des eaux douces. De la même façon, les eaux de recharge en conditions émergées sont définies par la même salinité constante des eaux douces : c_{fw}.

4.4.2 Conditions d'interface

Une paléocondition dite « d'interface » est reconstituée schématiquement afin de décrire l'évolution de l'épaisseur de l'aquitard argileux tout au long de la période de sédimentation active. Cette paléocondition d'interface est modélisée sous la forme de séries temporelles.

Épaisseur de l'aquitard argileux

Représentation symbolique : $B_{\mathrm{a}}(t)$ en sédiments poreux ; $b_{\mathrm{a}}(t)$ en sédiments « sans porosité »

Une troisième et dernière série temporelle est construite afin de modéliser l'évolution dans le temps de l'épaisseur de référence de l'aquitard argileux (AA). Deux types de scénarios sont considérés : à accumulation linéaire (à taux constant), ou à accumulation non linéaire (à taux décroissant dans le temps). Dans un cas comme dans l'autre, la finalité est d'avoir accumulé l'épaisseur de sédiments fins adéquate pour former un AA d'épaisseur représentative de l'AA réel et de porosité moyenne également proche de celle rapportée pour l'AA réel. À cette fin, l'épaisseur finale (actuelle) jugée typique de l'AA réel de notre région d'étude est $B_{\mathrm{a.act}}$ = 30 m. Une porosité pseudo-actuelle dite « de conversion » ($n_{\mathrm{tot.conv}}$) est définie en complément de la porosité de référence ($n_{\mathrm{tot.act}}$ = 0.64) en vue de traduire la série $B_{\mathrm{a}}(t)$ « avec porosité » en une série $b_{\mathrm{a}}(t)$ « sans porosité » (c.-à-d. ne considérant que les solides). La valeur de ce paramètre a été déterminée par essais et erreurs, jusqu'à ce que les modèles de sédimentation-consolidation de la Section 5.C forment une colonne de sédiments d'une épaisseur de 30 m ayant une porosité moyenne de ~0.64 (dans sa partie inférieure), et finalement fixée à $n_{\mathrm{tot.conv}}$ = 0.675. Par conséquent, l'épaisseur actuelle sans porosité à atteindre est donc évaluée à $b_{\mathrm{a.act}} = B_{\mathrm{a.act}}/(1 - n_{\mathrm{tot.conv}})$ = 9.75 m. Le paramètre b_{a} constitue de fait une mesure plus directe de la quantité de sédiments accumulés, puisque indépendante de la porosité et donc du degré de consolidation des sédiments.

La période de sédimentation active s'étend de $t_{\mathrm{sed.beg}} = 50\ \mathrm{a}$ jusqu'à $t_{\mathrm{sed.eng}} = 2000\ \mathrm{a}$ et dure donc $t_{\mathrm{sed.dur}} = t_{\mathrm{sed.eng}} - t_{\mathrm{sed.beg}} = 1950\ \mathrm{a} = 1.95\ \mathrm{ka}$. La variable de temps $t' = t - t_{\mathrm{sed.beg}}$, soit le temps relatif au début de la période de sédimentation, est définie en complément de la variable de temps principale t qui, rappelons-le, est le temps relatif au début de l'incursion marine.

Le scénario du premier type implique une accumulation continue des sédiments fins tout au long de la période de sédimentation active. Les séries temporelles d'épaisseur avec et sans porosité sont alors simplement définies par :

$$B_{\mathrm{a}}(t)_{lin} = t^* \cdot B_{\mathrm{a.act}}$$

$$b_{\mathrm{a}}(t)_{lin} = t^* \cdot b_{\mathrm{a.act}}$$

où $t^* = \max\left(t - t_{\mathrm{sed.beg}}\,;\, 0.0\ \mathrm{ka}\right) / \left(t_{\mathrm{sed.end}} - t_{\mathrm{sed.beg}}\right) \in [0.0,\ 1.0]$ est le temps normalisé à l'intérieur de la période de sédimentation [–].

Dans notre scénario du premier type, l'évolution de l'épaisseur de l'AA est linéaire dans le temps (voir Figure 45). Le taux de sédimentation, constant dans le temps durant toute la période de sédimentation, est donc s_{a} = 0.500 cm/a en termes de hauteur de sédiments sans porosité, soit l'équivalent de 1.54 cm/a en termes de sédiments de porosité pseudo-actuelle.

Les scénarios du second type ont une formulation quelque peu plus élaborée. L'évolution non linéaire de l'épaisseur de l'AA est décrite via un modèle analytique simulant une décroissance non linéaire du taux de sédimentation au cours du temps. Le modèle analytique de Ballantyne (2002) est retenu à cette fin, en raison de son élégante simplicité du point de vue conceptuel, d'une part, et de sa représentativité générale en contexte paraglaciaire, d'autre part :

$$s_{\mathrm{a}}(t')_{nlin} = \begin{cases} 0\ \mathrm{m/a}, & t' < 0\ \mathrm{a} \ \vee \ t' > t_{\mathrm{sed.dur}} \\ s_{\mathrm{a0}} * e^{-\lambda_{\mathrm{a}}\, t'}, & t' \geq 0\ \mathrm{a} \ \wedge \ t' \leq t_{\mathrm{sed.dur}} \end{cases}$$

où $t' = t - t_{\mathrm{sed.beg}}$ est le temps relatif au début de la période de sédimentation, exprimé ici en années [a] ; $s_{\mathrm{a}}(t')$ est le taux de sédimentation au temps relatif t' [m/a] ; s_{a0} est le taux de sédimentation maximal au tout début de la période de sédimentation [m/a] ; et λ_{a} est le paramètre contrôlant le taux de décroissance exponentielle du modèle [a^{-1}]. La formule décrivant l'évolution de l'épaisseur de l'AA « sans porosité » (b_{a}) s'obtient alors par intégration de $s_{\mathrm{a}}(t')$, mais en limitant les calculs de $b_{\mathrm{a}}(t')$ à la période de sédimentation active ($0\ \mathrm{a} \leq t' \leq t_{\mathrm{sed.dur}}$) :

$$b_{\mathrm{a}}(t')_{nlin} = \frac{s_{\mathrm{a0}}}{\lambda_{\mathrm{a}}} * \left[1 - e^{-\lambda_{\mathrm{a}}\, t'}\right]$$

La construction d'un scénario du second type requiert de trouver par optimisation la valeur de λ_{a} compatible avec le s_{a0} choisi de sorte que $b_{\mathrm{a}}(t' = t_{\mathrm{sed.dur}})_{nlin} = b_{\mathrm{a.act}}$. Dans notre scénario du second type privilégié, s_{a0} = 0.016 m/a et, par optimisation, nous obtenons $\lambda_{\mathrm{a}} \approx 1.6\times10^{-3}$ a^{-1}. Ce scénario correspond à des taux initiaux de sédimentation de 5.3 cm/a (lorsque traduits en termes de sédiments de porosité pseudo-actuelle).

Le principal avantage du scénario du premier type est l'extrême simplicité de sa formulation et donc de son application. En particulier, un taux de sédimentation constant facilite la résolution du problème de sédimentation-consolidation abordé numériquement plus loin dans cette étude (voir Section 5.C). Un scénario de type linéaire est utilisé dans certaines études liées à la Mer de Champlain (ex. Scott, 2003). Pourtant, un tel modèle est plus difficilement compatible avec les inférences faites dans la littérature à propos de la dynamique régionale de sédimentation dans la Vallée du Saint-Laurent pendant l'épisode de la Mer de Champlain, ou sur la sédimentation paraglaciaire en général. Par exemple, Ross *et al.* (2006) ont déduit des taux de sédimentation beaucoup plus élevés au début de l'épisode d'incursion marine de la Mer de Champlain. De plus, l'argumentaire solide associé au au modèle de Ballantyne (2002) appuie également le scénario à taux de sédimentation décroissant au cours du temps. Par conséquent, c'est le scénario du second type (décroissance non linéaire du taux de sédimentation) qui est jugé le plus attractif dans cette étude — bien qu'il ne soit finalement pas utilisé dans les modèles 2Dxz présentés à la Section 5.D, afin que ces modèles demeurent plus simples et qu'ainsi l'interprétation des résultats simulés par ceux-ci soit facilitée.

En outre, les taux de sédimentation des argiles de la Mer de Champlain étant à ce jour très peu contraints par des données issues d'observations de terrain, plusieurs hypothèses sont faites dans la conceptualisation de la formation de l'AA. En effet, on assume non seulement que la période de sédimentation est rigoureusement concomitante à l'épisode marin, mais aussi que la répartition des apports sédimentaires est globalement uniforme dans le bassin de formation de l'AA. Cette hypothèse d'une répartition relativement uniforme des apports sédimentaires dans le bassin marin se justifie par le fait que dans l'environnement glaciomarin-marin d'alors, les flux de sédiments fins destinés aux parties plus basses et distales — c.-à-d. à distance des berges comme du front glaciaire — devaient être surtout hypopycnaux, transportant des quantités importantes de farine glaciaire par suspension dans l'eau de la mer (Syvitski *et al.*, 1996).

Notre méthodologie permet malgré tout de représenter la formation d'un AA d'épaisseur inhomogène. En effet, dans le cas d'un modèle 2Dxz dans lequel l'épaisseur finale de l'AA varie dans l'espace et est décrite par $B_{\mathrm{a.act}}(x)$, on peut dériver, d'un modèle de référence $s_{\mathrm{a}}^{*}(t')$ lié à une épaisseur finale (actuelle) de référence $B_{\mathrm{a.act}}^{*}$ arbitrairement choisie, des modèles locaux $s_{\mathrm{a}}(x, t')$ pour toute position x à l'intérieur du domaine, par l'entremise de la formule suivante :

$$s_{\mathrm{a}}(t', x) = s_{\mathrm{a}}^{*}(t') \ * \ \frac{B_{\mathrm{a.act}}(x)}{B_{\mathrm{a.act}}^{*}} \tag{35}$$

où $s_{\mathrm{a}}^{*}(t')$ est le modèle « de référence » choisi pour décrire l'évolution temporelle du taux de

sédimentation [m/a] associée à l'épaisseur finale « de référence » $B^{*}_{\mathrm{a.act}}$ [m], tandis que $s_{\mathrm{a}}(t', x)$ définit les modèles « locaux » décrivant les évolutions temporelles distinctes du taux de sédimentation [m/a] associées aux différentes épaisseurs finales « locales » de l'aquitard, $B_{\mathrm{a.act}}(x)$ [m]. Cette formulation de s_{a} en fonction à la fois de t' et de x (Équation 35) permet ainsi, en pratique, de simuler la formation d'un AA d'épaisseur finale inhomogène à l'intérieur de la période de sédimentation active considérée.

4.4.3 Conditions initiales dans le système aquifère

Les conditions initiales à l'intérieur du système aquifère régional sont définies comme si le système était en équilibre complet avec les conditions imposées initialement à sa surface par la Mer de Champlain, en termes de charges hydrauliques; comme si aucunes fines n'avaient été déposées préalablement à l'épisode marin; et enfin, comme si l'aquifère rocheux avait pu être entièrement nettoyé dans sa partie supérieure plus perméable — c.-à-d. hormis les saumures profondes — de toute salinité héritée d'invasions marines antérieures ou d'autres processus historiques. La circulation prolongée d'eaux de recharge sous-glaciaires dans la partie suffisamment perméable de l'AR pendant la fin de la glaciation et la déglaciation subséquente, ou encore le blocage temporaire des échanges avec la surface dû à un épais pergélisol ou à la nature alors froide de la base du glacier, seraient autant de phénomènes qui pourraient expliquer ce nettoyage de la salinité souterraine préalablement à l'épisode marin (Clark *et al.*, 2000; Lemieux *et al.*, 2008b; McIntosh *et al.*, 2012; Person *et al.*, 2012; Provost *et al.*, 2012).

Par conséquent, la salinité initiale de l'eau souterraine est présumée minimale (eaux douces) dans toute la partie supérieure du système aquifère régional (soit à des profondeurs de moins de 500 m). Plus en profondeur dans l'AR, on considère la présence de saumures stagnantes. La salinité initiale y est donc plutôt modélisée en fixant au fond (plancher) du modèle des salinités égales à la salinité de référence des saumures ($c = c_{\mathrm{db}}$), puis en étalant ensuite ces c élevées (jusqu'à des profondeur de ~600 m) suivant une méthode de « pré-diffusion » inspirée d'autres travaux de modélisation paléo-hydrogéologique (Lemieux *et al.*, 2008a; Provost *et al.*, 2012).

De plus, les possibles surpressions héritées de la présence récente des glaciers sont jugées peu importantes et donc négligées dans notre conceptualisation, nonobstant les mises en garde faites par certains auteurs (ex. Lemieux & Sudicky, 2011; Person *et al.*, 2012). Ce choix est justifié notamment par le fait que, contrairement aux grands systèmes aquifères (ex. des bassins sédimentaires entiers) typiquement investigués dans les études paléo-hydrogéologiques où des

« anomalies de surpression » actuelles importantes sont souvent observées (ex. Khader & Novakowski, 2014), l'AR de notre région d'étude ne comprend pas de formation géologique aquitard extrêmement peu perméable ($K \ll 10^{-9}$ m/s) à l'intérieur de l'horizon de profondeurs modélisé (0 – 1 km). En outre, on néglige aussi les perturbations hydromécaniques découlant de la flexure de la lithosphère liée à l'ajustement glacio-isostatique de la croûte continentale, plus intensive durant la dernière période glaciaire mais encore active aujourd'hui (Neuzil, 2012).

4.5 Les processus internes

Puisque le problème étudié met en jeu une large gamme de salinités, il faut que les processus internes considérés soient aptes à simuler adéquatement les effets de la densité variable des eaux souterraines, dans les phases de modélisation s'y prêtant. Et comme la densité de l'eau (ρ) est fonction directe de sa salinité (c), il est de fait essentiel de considérer le couplage entre les processus physiques décrivant l'écoulement de l'eau et ceux décrivant le transport des solutés.

L'écoulement monophasique des eaux souterraines se fait par convection, soit « forcée », là où contrôlé par une force externe tel un gradient hydraulique notable, soit « libre », là où contrôlé essentiellement par les forces internes de flottabilité ("buoyancy") dues aux différences locales de la densité du fluide, soit mixte, si les deux types de convection agissent (Diersch, 2014). Dans les premiers modèles numériques proposés, seule la convection forcée (ou autrement dit l'advection) est considérée — à l'exception du premier modèle strictement diffusif — puisque la densité variable de l'eau est alors ignorée. Dans la dernière étape de modélisations numériques, les trois types de convection de l'eau sont considérés du fait que l'on tient compte de la densité variable de l'eau et qu'un domaine en 2Dxz est considéré.

Les processus physiques retenus pour simuler le transport des solutés dans la sous-surface comprennent : la diffusion, la convection (modèle 2Dxz) ou advection (certains modèles 1D), et la dispersion hydrodynamique du soluté d'intérêt, à savoir la salinité (c) (Ingebritsen *et al.*, 2006). Tout autre processus géochimique de réactivité est ignoré ; il est donc assumé que la salinité se comporte en soluté conservatif. La dynamique du système modélisé est quantifiée notamment par le biais de flux d'eau (q_{f}) et de flux de masse (q_{m}) dérivés des simulations numériques. Les flux de masse peuvent être décomposés en termes de flux advectifs et de flux dispersifs dans le cas général, ou en termes de flux strictement diffusifs dans les cas particuliers où l'advection d'eau est nulle. Ces différents flux de masse sont définis plus loin, à même les résultats (Section 5).

De la prise en compte des effets de la densité variable dans le modèle 2Dxz, devraient découler au moins deux phénomènes fort intéressants à étudier : la digitation (“fingering”) des eaux de salinités (et donc de densités) contrastées, et la plongée densitaire (“sinking”) des eaux les plus denses, toutes deux liées à la présence d’eaux plus denses au-dessus d’eaux moins denses et dues à la convection libre (Simmons, 2005; Xie *et al.*, 2012).

Des processus moins couramment abordés dans des travaux de modélisation hydrogéologique mais non moins importants sont combinés ici sous l’expression « sédimentation-consolidation » (S&C). Ce processus de S&C est examiné ici afin d’évaluer l’ampleur des flux d’eau expulsés de l’AA (par advection) au cours de sa formation. La description physique du processus de S&C se fonde sur les travaux de Wangen (1992). Les processus inclus dans notre conceptualisation de la S&C comprennent notamment l’évolution des propriétés hydrauliques (n_{tot}, K, et S_{s}) de l’AA tout au long de sa formation, sous l’effet de la consolidation progressive des sédiments qui le constituent, laquelle est entretenue par la sédimentation, conformément au cadre théorique choisi (Wangen, 1992). Cependant, il est important de souligner que, dans la présente étude, le sous-problème de la S&C n’est abordé qu’en 1D et seulement pour l’AA en formation. Seule une approximation partielle des phénomènes liés à la S&C sera considérée dans le modèle 2Dxz, le couplage complet de la S&C avec les autres processus du modèle 2Dxz présentant trop de défis techniques. Tout processus susceptible de modifier les propriétés hydrauliques de l’AA autre que le processus de S&C est ignoré.

Enfin, plusieurs processus autres ne sont pas considérés dans cette étude, dont la liste qui suit n’est pas exhaustive. Notamment, le transfert (typiquement diffusif) d’une part de la salinité vers la porosité immobile du milieu aquifère n’est pas simulé, l’adsorption transitoire d’une fraction de la masse du soluté à la surface des solides non plus. En outre, le transfert de chaleur au sein du système aquifère régional ainsi que ses effets hydrogéologiques en particulier sur la densité de l’eau souterraine sont complètement ignorés.

5. Résultats de la modélisation des processus d’invasion marine du système aquifère rocheux

Les trois premières étapes de modélisation numérique présentées dans cette section (A, B, C) explorent les processus individuels de migration de la salinité à travers l’aquitard. Les processus de transport de la salinité y sont abordés un à un, en commençant par la diffusion seule, d’abord

dans l'aquitard pleinement formé après l'épisode marin (modèle A1), et ensuite pendant et après sa formation (modèle A2). Ensuite, le rôle potentiel du transport advectif-dispersif, qui serait lié à un écoulement d'eau à travers l'aquitard pendant et après sa formation est étudié (modèle B1). Puis, les processus physiques liés à la sédimentation-consolidation des argiles de la Mer de Champlain durant la formation de l'aquitard, sont abordés (modèles C1 et C2). Enfin, dans la dernière étape de modélisation numérique présentée (étape D), les processus de migration de la salinité dans le système aquifère-aquitard entier sont simulés de façon couplée et en interaction avec les paléoconditions imposées au modèle.

Il convient de rappeler ici les définitions des différentes composantes d'un flux de masse lié au transport de masse d'un soluté en milieu poreux simple. Les définitions présentées ici utilisent la formulation 1D, la plus simple, d'abord pour faciliter l'explication, et puisque les flux de masse ne sont de toute façon calculés explicitement qu'à partir des résultats des simulations 1D de l'étude. Deux composantes sont typiquement considérées pour représenter la masse de soluté traversant une section unitaire de milieu poreux en un temps unitaire : un flux advectif ($q_{\mathrm{m.a}}$) et un flux dispersif ($q_{\mathrm{m.d}}$) (Équations 36a et 36b). Toutefois, dans le cas où il n'y a pas d'advection, il n'y a pas non plus de dispersion mécanique : le flux dispersif se résume alors à un flux strictement diffusif (puisque $D_{\mathrm{L}} = D_{\mathrm{e}}$). Enfin, le flux de masse total ($q_{\mathrm{m.\Sigma}}$) est simplement la somme des flux advectifs et dispersifs (Équation 36c). Le concept de flux de masse est utilisé ci-après lors de l'interprétation des résultats des simulations (modèles 1D seulement, principalement pour des raisons d'ordre technique), parce qu'il permet de dresser un portrait quantitatif des transferts opérant entre les compartiments des modèles et aussi avec l'extérieur.

$$q_{\mathrm{m.a}} = q_{\mathrm{f}}\, c \tag{36a}$$

$$q_{\mathrm{m.D}} = -D_{\mathrm{L}} \frac{\partial c}{\partial l} \tag{36b}$$

$$q_{\mathrm{m.\Sigma}} = q_{\mathrm{m.a}} + q_{\mathrm{m.D}} \tag{36c}$$

où les indices L ou l indiquent la nature longitudinale de certains paramètres, $D_{\mathrm{L}} = \alpha_{\mathrm{L}} v_l + D_e$ est le coefficient de dispersion hydrodynamique longitudinale [m^2/s], D_e est la diffusivité effective [m^2/s], α_{L} est la dispersivité longitudinale [m], $v_l = q_{\mathrm{f}}/n_{\mathrm{eff}}$ est la vitesse de l'eau dans la porosité effective [m/s], et n_{eff} est la porosité effective du milieu poreux [–].

Un concept flexible de « masse cumulée » (symbolisé par M) est aussi défini en préparation à l'interprétation des résultats simulés par les modèles numériques. Ce concept peut représenter la masse cumulative transférée (migrée) d'un endroit à un autre (pouvant être hors modèle) par un processus donné, dans lequel cas on l'évalue par intégration dans le temps du flux de masse concerné. Autrement, la « masse cumulée » correspond à la masse totale de salinité à l'intérieur d'une zone d'un modèle ou d'un modèle entier, dans lequel cas on l'évalue plutôt par intégration dans l'espace des salinités simulées. De plus, il est à noter qu'une valeur de M calculée à partir d'une simulation numérique 1D, bien que présentée en kilogrammes [kg], devrait plutôt s'interpréter en tant que « kilogrammes par mètre carré de surface au sol » [kg/m^2], dans sa traduction pratique. Similairement, en 2D, une masse cumulée, toujours en kilogrammes, pourra s'interpréter en tant que « kilogrammes par mètre d'extension latérale perpendiculairement à la coupe 2D » [kg/m]. Ces stratégies d'interprétation peuvent être appliquées par le lecteur intéressé, par exemple dans le but d'estimer la masse cumulée (et intégrée) à l'échelle d'une zone géographique.

5.A Transport diffusif 1D dans l'aquitard

Il est intéressant, pour commencer, de produire de premiers estimés de l'évolution de la salinité au sein de l'aquitard argileux (AA) en ne considérant que le processus de diffusion (transport de masse diffusif), ce processus étant vraisemblablement dominant dans l'AA en raison de la faible conductivité hydraulique (K).

Modèle A1 : Transport diffusif 1D dans l'aquitard, de la fin de l'épisode marin jusqu'à aujourd'hui (et temps futurs)

Dans ce premier modèle, le plus simple, l'évolution de la salinité dans l'aquitard argileux n'est étudiée qu'à partir de la fin de l'épisode marin, en considérant que l'aquitard est entièrement formé et que la salinité est à ce moment ($t = 2\ \mathrm{ka}$) maximale (marine) sur toute son épaisseur.

Approche de simulation

L'approche de simulation est simple. Un modèle unidimensionnel de l'AA pleinement formé est préparé. Le domaine 1Dz considéré va de z' = 0 m (toit de l'AA) jusqu'à z' = 30 m (base de l'AA), soit l'épaisseur actuelle typique de l'AA réel de notre région d'étude ($B_{\mathrm{a.act}}$ = 30 m) définie plus

tôt. Ce premier modèle ne permettant pas de représenter la formation de l'AA, un temps relatif à la fin de l'épisode marin est considéré ici, à travers la définition de la variable $t' = t - 2\ \mathrm{ka}$. La dynamique pour $t < 2\ \mathrm{ka}$ (soit $t' < 0\ \mathrm{ka}$) est de ce fait ignorée.

Dans ce cadre unidimensionnel, l'équation de transport à résoudre est l'Équation 37a, avec comme conditions initiales une salinité maximale (marine) partout dans le domaine (Équation 37b), et comme conditions aux limites une salinité minimale (douce) au toit de l'AA (Équation 37c) et un gradient de salinité nul à la base de l'AA (Équation 37d). Ces conditions initiales et aux limites simplistes sont expressément considérées ici de sorte que la comparaison des résultats issus du présent modèle (A1) à ceux du modèle suivant (A2) permette d'apprécier l'impact de la diminution tardive de la salinité marine sur l'évolution subséquente de la salinité dans l'AA jusqu'à aujourd'hui. La solution analytique approximative "A3" proposée par Van Genuchten & Alves (1982) est sélectionnée afin de résoudre ce problème. Un programme en langage R a été conçu pour faire les calculs et ainsi réaliser les simulations numériques dont les résultats sont présentés ci-après. Ce programme est disponible en Annexe A8.3.

$$\frac{\partial c^*}{\partial t'} = D_{\mathrm{e.AA}} \frac{\partial^2 c^*}{\partial z'^2} \tag{37a}$$

$$c^*(z', t' = 0) = 1 \tag{37b}$$

$$c^*(z' = 0, t') = 0 \tag{37c}$$

$$\frac{\partial c^*}{\partial z'}(z' = B_{\mathrm{a.act}}, t') = 0 \tag{37d}$$

où c^* est la salinité relative par rapport à la salinité de référence de l'eau marine (c_{swref}) [–], z' est la profondeur dans l'aquitard pleinement formé [m], t' est le temps relatif à la fin de l'épisode marin [ka], $B_{\mathrm{a.act}}$ est l'épaisseur de l'aquitard [= 30 m], et $D_{\mathrm{e.AA}}$ est la diffusivité effective dans l'aquitard [m^2/s].

Une valeur de porosité égale à la valeur de référence pour l'AA, soit $n_{\mathrm{AA}} = n_{\mathrm{tot.act}}$ = 0.64, est considérée ici, puisqu'on cherche à reproduire le profil vertical des salinités (TDS) observées aujourd'hui dans l'aquitard du site de Varennes, au nord-ouest de la région d'étude, où la porosité moyenne des argiles a été estimée à 0.64 (Desaulniers & Cherry, 1989). De la même façon, la valeur de diffusivité effective de $D_{\mathrm{e.AA}}$ = 1×10^{-9} m^2/s établie plus tôt est utilisée ici.

La salinité des eaux marines (c_{swref}) ainsi que celle des eaux douces (c_{fw} = 0.250 g/L) sont appliquées afin de calculer les salinités réelles c [g/L] à partir des c^* relatives simulées. La valeur c_{swref} est optimisée au cours de l'exercice de calage du modèle, et non prédéterminée.

Bien des complexités sont négligées dans ce premier exercice de modélisation, notamment :

- L'épisode marin étant exclu de la période simulée, la dynamique de la salinité dans l'aquitard pendant l'épisode marin est ignorée.
- L'advection (lente) de l'eau au sein de l'AA est complètement négligée à ce stade, excluant donc du fait même la convection et ainsi le transport convectif-dispersif de la salinité associé, qui serait lié aux effets de la densité variable, également ignorés ici.
- La dynamique et la présence même de l'aquifère rocheux sont exclues du problème. La condition de gradient de salinité nul imposée à la base de l'AA se traduit ici par un flux de salinité également nul en tout temps à cet endroit : $q_{\mathrm{m.d}}(z' = B_{\mathrm{a.act}}, t')$ = 0 g/a, puisqu'il n'y a aucune advection d'eau. Il est pertinent de noter que c'est néanmoins en anticipant sur l'importance du processus convectif et en considérant le contraste très fort entre la K de l'AR et la K de l'AA ($K_{\mathrm{AR}}/K_{\mathrm{AA}}$ ~ 10^3) que le choix de cette condition de gradient nul s'est trouvé justifié.
- Le processus de sédimentation-consolidation de l'AA est négligé. Dans ce premier modèle (A1), ce n'est pas une simplification gênante car, la sédimentation étant assumée terminée à la fin de l'épisode marin, la consolidation devrait être elle aussi pratiquement achevée au temps de départ de cette simulation ($t' = 0\ \mathrm{ka} \Longrightarrow t = 2\ \mathrm{ka}$). Cette hypothèse de travail a, en fait, pu être vérifiée grâce aux modélisations de l'étape C (Section 5.C).
- En outre, la variabilité spatiale (hétérogénéité) et temporelle des propriétés à l'intérieur de l'AA — la porosité et la diffusivité étant les seules propriétés pertinentes ici — est négligée, d'où, par conséquent, la présence d'une zone superficielle altérée à K accrue l'est aussi.

Le paramètre de salinité des eaux marines, c_{swref}, a été optimisé manuellement jusqu'à ce que les salinités simulées s'ajustent bien au profil de salinité observé au site de Varennes au temps actuel (Desaulniers & Cherry, 1989), dont les données sont présentées conjointement avec les résultats simulés (en commençant par ceux du modèle A1, dans la Figure 46b qui suit ; puis de façon plus complète et mieux contextualisée dans la Figure 56 de la Section 5.D, plus loin).

Résultats

Les résultats de la simulation numérique réalisée à partir du modèle A1 optimisé sont présentés dans la Figure 46, en termes de salinités relatives (c^*) ou absolues (c), de flux de masse (q_{m}) et de masses cumulées (M). La période investiguée est prolongée exceptionnellement jusqu'à $t = 40\ \mathrm{ka}$, soit 27 ka dans le futur. Ces résultats montrent tout d'abord que le processus de diffusion a un effet considérable sur la salinité dans l'AA. Au cours de la portion passée de la période simulée, soit de $t \in$ 2 à 13 ka, les profils verticaux de salinité indiquent une diminution notable, et ce à toutes les profondeurs dans l'AA — sauf au niveau de son toit puisqu'une salinité minimale y est constamment imposée (Figure 46a,b). Les premiers profils verticaux ($t \leq 3\ \mathrm{ka}$) illustrent bien qu'il y a progression de la profondeur d'un « front » de désalinisation par diffusion (Figure 46b), front qui atteint la base de l'AA vers ~4 ka, en se basant sur l'isoligne de salinité relative $c^* = 0.99$ (Figure 46a). Les flux de masse diffusifs sont maximaux au tout début de la période simulée ($t \approx 2\ \mathrm{ka}$), en raison des plus forts gradients verticaux de salinité, et sont en tout temps ascendants et destinés à la surface (Figure 46c). On remarque dans la Figure 46b le bon calage du profil vertical de salinité actuel simulé (à $t = 13\ \mathrm{ka}$) au profil observé et rapporté par Desaulniers & Cherry (1989). Le profil simulé a été obtenu en considérant une salinité des eaux marines de c_{swref} = 24 g/L. Cela suggère qu'une salinité de fond de la Mer de Champlain plutôt élevée, de l'ordre de $\sim 2/3 * c_{\mathrm{ocean}}$, serait un scénario vraisemblable pour cet épisode marin. L'ajustement moins bon dans la portion superficielle de l'AA peut s'expliquer par le fait que l'altération-fissuration de cette portion de l'AA et le lessivage advectif qu'elle permet à long terme n'ont pas du tout été considérés ici. Enfin, la Figure 46d montre que la diminution du stock de salinité dans l'AA depuis l'épisode marin, bien qu'importante (-69 %) en date d'aujourd'hui ($t = 13\ \mathrm{ka}$), n'est pas terminée. D'après la simulation, la désalinisation de l'AA se poursuivrait pendant quelque 21 ka dans le futur avant que le stock de salinité ne devienne une fraction infime (< 5 %) de ce qu'il était au départ.

Les résultats du modèle A1 (Figure 46 dans son ensemble) suggèrent ainsi que la salinité n'est pas encore stabilisée dans l'AA et qu'elle ne peut donc être expliquée par les seules conditions environnementales actuelles. De plus, ce premier modèle met en lumière le fait que la diffusion joue un rôle majeur dans l'évolution de la salinité au sein de l'AA consécutivement au retrait de la mer.

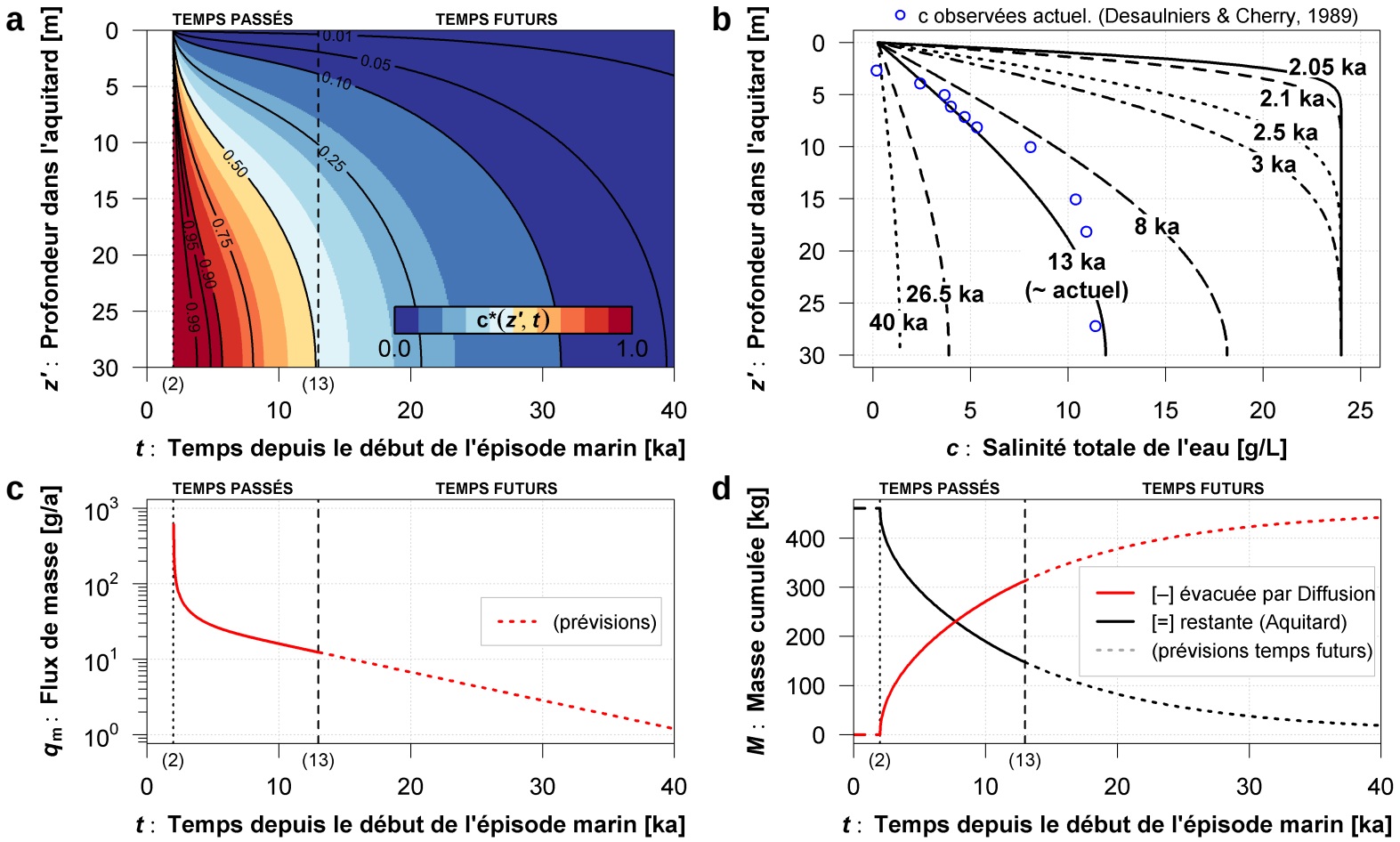


Figure 46 : Résultats du modèle A1 : Transport strictement diffusif, seulement vers le toit de l'AA. (a) Évolution spatiotemporelle de la salinité relative à l'intérieur de l'AA, en fonction de la profondeur dans l'AA et du temps depuis le début de l'épisode marin. (b) Profils verticaux de salinité à huit temps choisis, dont un profil pour le temps actuel (t = 13 ka) qui est comparé au profil discontinu de salinités actuelles rapporté pour le site de Varennes dans Desaulniers & Cherry (1989). (c) Évolution temporelle du flux de masse sortant au toit de l'AA. (d) Évolutions temporelles de la masse cumulative expulsée de l'AA et de la masse totale restante dans l'AA. L'intervalle de salinités utilisé dans cette simulation est 0.250 g/L ≤ c ≤ 24.0 g/L. Fin de l'épisode marin (et début de la simulation) à t = 2 ka.

Par ailleurs, il est intéressant de noter qu'il n'est pas pertinent de répéter le même exercice dans l'intention de simuler un transport strictement diffusif de la salinité au sein de l'aquifère rocheux, puisqu'il est clair, à partir d'un simple a priori conceptuel, que les flux de masse convectifs y seront prédominants par rapport aux flux de masse diffusifs, en raison de la K significativement plus élevée du roc peu profond.

Bien qu'instructive, cette première étape de modélisation A1 est jugée insuffisante en termes de complexité et de représentativité pour permettre une appréciation décisive de l'importance du processus de diffusion dans l'AA. En effet, trop peu des composantes du modèle conceptuel sont considérées dans le modèle A1. Parmi celles-ci, la réduction de la salinité des eaux de la Mer de Champlain à partir d'un temps seuil t_{swchg}, et son interaction avec le processus d'accumulation des sédiments fins formant l'AA, pourraient avoir résulté en un profil vertical de salinité différent au temps choisi en A1 pour débuter la simulation ($t = 2$ ka). L'étape de modélisation suivante (A2) est réalisée afin de vérifier cette hypothèse, et d'en déceler les implications.

Modèle A2 : Transport diffusif 1D dans l'aquitard, pendant et après sa formation

Le but de cette deuxième modélisation numérique (A2) est de tester une version améliorée du modèle précédent (A1) dans laquelle l'évolution de l'AA est simulée non seulement après mais aussi pendant l'épisode marin, à la fois en termes de salinités internes et d'épaisseur totale. De cette façon, on devrait s'approcher d'une reconstitution plus réaliste du profil de salinité dans l'AA vers la fin de l'épisode marin.

Approche de simulation

Dans le logiciel FEFLOW, un modèle numérique est préparé sous la forme d'une colonne 2D verticale d'éléments rectangulaires. La colonne, large d'un seul élément, correspond à une représentation ~1Dz de l'AA entièrement formé ($B_{\mathrm{a.act}}$ = 30 m d'épaisseur finale) et de la partie supérieure de l'AR sous-jacent (20 m sont considérés), soit un modèle d'une hauteur totale de 50 m. La largeur de la colonne est choisie unitaire (Δx = 1.0 m), facilitant ainsi le calcul des flux verticaux. De par sa construction, les gradients horizontaux simulés dans ce modèle numérique sont nuls, abstraction faite des inévitables erreurs numériques (tant pour les h que pour les c), c'est-à-dire que les valeurs simulées aux nœuds sont égales pour la bordure gauche et la bordure droite du modèle, respectant ainsi la dimensionnalité 1Dz visée pour ce modèle.

Un *plugin* de type “IFM” (de l’anglais “FEFLOW Interface Manager”) dénommé « PaleoSea1D » a été programmé par les auteurs expressément pour cette famille de simulations (voir Annexe A8.3). Celui-ci gère la modification dans le temps des conditions aux limites de façon à ce que, à chaque pas de temps de simulation, les nœuds du maillage se trouvant encore au-dessus du niveau prédit pour le toit de l’AA soient neutralisés en y imposant à tous comme concentration fixée la salinité variable de la mer, $c = C_{\mathrm{sw}}(t)$, tout en s’assurant que tous les nœuds situés à l’intérieur de l’AA au temps t, ou de l’aquifère rocheux (AR), soient exempts ou libérés d’une telle contrainte. La limite supérieure effective du modèle ~1Dz peut ainsi simuler la formation (l’épaississement) de l’AA au fil du temps, avec une salinité imposée en fonction de celle du plan d’eau inondant. Une salinité de départ pour la Mer de Champlain égale à la valeur optimale obtenue à l’étape précédente (modèle A1) est considérée comme paramètre a priori, soit : $C_{\mathrm{sw}}(t = 0\ \mathrm{ka}) = c_{\mathrm{swref}}$ = 24 g/L. Néanmoins, encore ici, l’intention demeure d’ajuster (au besoin) le paramètre c_{swref} pour caler le modèle au profil observé au site de Varennes. Un nouveau paramètre à optimiser au cours du calage est le temps seuil t_{swchg} auquel la salinité marine $C_{\mathrm{sw}}(t > t_{\mathrm{swchg}})$ commence à décliner.

Les propriétés hydrauliques utilisées pour l’AA sont identiques à celles utilisées dans le modèle précédent (A1) : n_{AA} = 0.64 et $D_{\mathrm{e.AA}}$ = 1×10^{-9} m^2/s. Pour l’AR, la porosité de référence n_{AR} = 0.01 ainsi que la diffusivité effective $D_{\mathrm{e.AR}}$ = 1×10^{-11} m^2/s établies plus tôt (en Section 4.3.2) sont utilisées.

Les complexités négligées dans ce second exercice de modélisation sont les mêmes que dans l’exercice précédent (A1), exception faite des améliorations propres au modèle A2, décrites tantôt. Il est à noter que l’AR, bien qu’inclus dans le modèle, y est représenté de façon si simple et déconnectée de sa dynamique réelle (comprenant une forte composante convective) que les résultats simulés à l’intérieur de l’AR ne doivent pas être valorisés lors de l’analyse des résultats. L’investigation de la dynamique du compartiment rocheux, de fait, requiert nécessairement des modélisations au moins bidimensionnelles (voir Section 5.D).

Résultats

Un bon calage a été obtenu en conservant la valeur initialement choisie pour c_{swref} = 24 g/L, et en considérant t_{swchg} = 1.5 ka. Ce constat suggère déjà que ce second modèle A2 ne présente vraisemblablement pas des résultats très différents par rapport au précédent (A1) en termes d’évolution de la salinité au sein de l’AA. Malgré cela, il demeure important d’examiner les résultats afin de voir ce que le modèle A2 apporte tout de même en informations nouvelles.

Les résultats de la simulation numérique réalisée à partir du modèle A2 sont présentés dans la Figure 47, en termes de salinités relatives (c^*) ou absolues (c), de flux de masse (q_{m}) et de masses cumulées (M).

- Tout d'abord, on constate que la désalinisation de l'AA débute avant la fin de l'épisode marin, en fait dès le moment où la salinité marine $C_{\mathrm{sw}}(t > t_{\mathrm{swchg}})$ amorce son déclin (Figure 47a). Cette désalinisation se fait essentiellement par migration diffusive de la salinité contenue dans l'AA vers la surface (Figure 47c).
- Avant le temps seuil t_{swchg} = 1.5 ka, la salinité interne dans l'AA étant partout égale à la salinité marine, il n'y a aucun gradient vertical de salinité au niveau du toit de l'AA, et donc aucuns flux diffusifs (tel qu'indiqué par l'absence de valeur pour la courbe rouge pour $t < 1.5\ \mathrm{ka}$ dans la Figure 47c).
- Au niveau de la base de l'AA, de très modestes transferts diffusifs se font à destination de l'AR (Figure 47c). Ces flux de masse sont motivés par le fort gradient entre la salinité élevée de l'AA et celle minime de l'AR supérieur, mais demeurent extrêmement limités en raison de la très faible diffusivité de l'AR — considérée 100 fois plus faible que celle de l'AA dans cette étude.
- La bonne concordance entre les profils de $c(z)$ simulés et observés pour le temps actuel (Figure 47b) conforte l'hypothèse émise par plusieurs auteurs selon laquelle l'évolution temporelle de la salinité dans plusieurs aquitards associés à la Mer de Champlain serait contrôlée principalement par la diffusion. Le modèle A2, tout comme le précédent A1, semble en effet suffisant pour reproduire un profil de salinité observé, bien qu'il ne considère que le processus de diffusion.
- L'AA, de par sa porosité totale élevée, accumule un important stock de salinité dissoute dans ses eaux interstitielles en piégeant les eaux marines tout au long de sa formation, eaux qui proviennent du fond marin, là même où la sédimentation des fines opère. Ce stock prédit par le modèle A2 s'avère toutefois semblable au stock prédit par le modèle précédent, A1, ce qui révèle que la considération d'une période de diminution de C_{sw} *tardive* dans l'épisode marin n'a pas une grande répercussion sur les profils de salinité dans l'AA à long terme (Figure 47d). Une différence notable est tout de même observée au niveau du stock accumulé en date de la fin de l'épisode marin (à t = 2 ka) : ~380 kg (/m^2) pour le modèle A2, contre ~460 kg (/m^2) pour le précédent modèle A1. Des

différences plus importantes auraient toutefois été obtenues en utilisant un t_{swchg} moins tardif, par exemple t_{swchg} = 0.5 ou 1.0 ka.

- L'AA constitue donc une importante réserve de salinité, dont le contenu peut migrer, ce essentiellement vers la surface si l'on ne se base que sur les résultats de ces deux premiers modèles (A1 et A2 : transport strictement diffusif).

Le modèle A2, toutefois, demeure bien trop simple pour permettre une investigation de la dynamique des écoulements et du transport de masse dans l'AR, puisque l'advection et ses processus associés ne sont pas considérés. Mais avant d'aborder le problème du transport advectif à l'échelle du système entier (AA et AR), il est pertinent d'étudier d'abord l'importance potentielle du transport advectif-dispersif à l'intérieur de l'AA. C'est ce qui est fait dans l'étape de modélisation suivante (B).

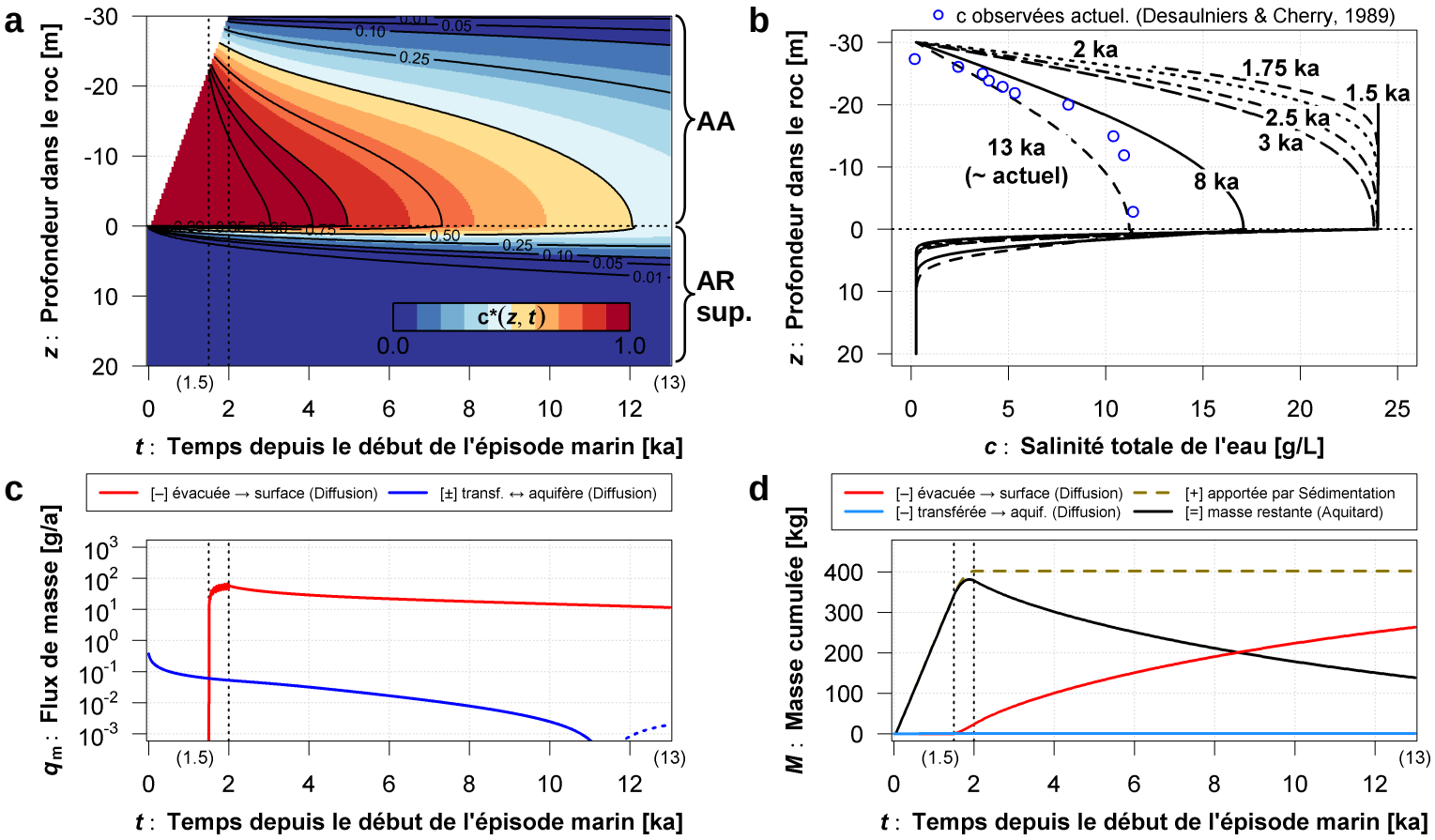


Figure 47 : Résultats du modèle A2 : Constitution du stock de salinité pendant la formation de l'AA et transport strictement diffusif de cette salinité de l'AA vers la surface et vers l'AR supérieur, du début de l'épisode marin (*t* = 0 ka) jusqu'à aujourd'hui (*t* = 13 ka). (a) Évolution de la salinité relative à l'intérieur de l'AA, en fonction de la profondeur dans l'AR et du temps. (b) Profils verticaux de salinité à sept temps choisis, dont un profil pour le temps actuel (*t* = 13 ka) qui est comparé au profil discontinu de salinités observées au site de Varennes par Desaulniers & Cherry (1989). (c) Évolution des flux de masse diffusifs à travers le toit et la base de l'AA. La courbe bleue en pointillés décrit des flux inversés. (d) Évolution de la masse accumulée (apportée) par la sédimentation en absence de tout autre transfert de masse ; de la masse totale restante dans l'AA, de la masse cumulative expulsée de l'AA vers la surface par diffusion et de la masse cumulative transférée de l'AA vers l'AR par diffusion. L'intervalle de salinités utilisé dans cette simulation est 0.250 g/L ≤ *c* ≤ 24.0 g/L (c.-à-d. identique à la simulation A1). Début et fin de l'épisode marin à *t* = 0 et *t* = 2 ka ; déclin de la salinité marine à partir du temps seuil t_{swchg} = 1.5 ka.

5.B Transport advectif-dispersif 1D dans l'aquitard

Dans cette deuxième étape de modélisations numériques, on s'intéresse à la composante advective du transport, ici dans un cadre simpliste ~1Dz, afin d'évaluer l'influence potentielle d'une dynamique convective de l'AR sur la migration de la salinité au sein de l'AA. En effet, l'entraînement densitaire et sa continuité advective potentiellement induite au sein de l'AA étaient totalement ignorés dans les modélisations de l'étape précédente (modèles A1 et A2).

Modèle B1 : Transport advectif-dispersif centré sur l'aquitard argileux pendant et après sa formation (avec advection)

Approche de simulation

L'approche de simulation ressemble beaucoup à celle suivie pour le modèle A2 et exploite aussi le logiciel FEFLOW. Le modèle B1 a donc encore la forme d'une colonne 2D verticale d'une hauteur « finale » de 50 m (30 m représentant l'aquitard, et 20 m de roc sous-jacent). Le *plugin* « PaleoSea1D » associé au modèle A2 est à nouveau mobilisé ici, avec un fonctionnement inchangé. Les paramètres associés au transport diffusif sont également repris du modèle A2 : n_{AA} = 0.64, $D_{\mathrm{e.AA}}$ = 1×10^{-9} m^2/s ; n_{AR} = 0.01, $D_{\mathrm{e.AR}}$ = 1×10^{-11} m^2/s.

Par contre, puisqu'on s'intéresse désormais à la composante advective du transport de masse, le simulateur numérique doit solutionner l'écoulement vertical de l'eau à travers le modèle parallèlement au transport de masse. De nouvelles propriétés hydrauliques doivent alors être attribuées à chacun des deux compartiments du modèle. Des propriétés uniformes à l'intérieur de chaque compartiment sont postulées. Pour l'aquitard argileux (AA), une conductivité hydraulique (K) de K_{AA} = 1×10^{-9} m/s est considérée, tandis que, pour l'aquifère rocheux (AR), une K beaucoup plus élevée de K_{AR} = 1×10^{-6} m/s est retenue. Cette valeur élevée, basée sur la valeur K_{cst} définie lors de la conceptualisation de l'AR en Section 4.3.2, est retenue puisqu'on simule ici la portion supérieure de l'AR seulement. Les paramètres de dispersivité longitudinale (α_{L}) appliqués dans le modèle B1 sont définis en fonction de l'échelle verticale caractéristique (L) de chaque compartiment, à partir des relations empiriques entre α_{L} et L établies par Schulze-Makuch (2005). Ainsi, pour l'AA, partant de L_{AA} ~ $B_{\mathrm{a.act}}$ = 30 m, on fixe le paramètre à $\alpha_{\mathrm{L.AA}}$ = 1 m en utilisant la relation empirique établie par l'auteur pour les sédiments meubles ; pour l'AR, comme L_{AR} ~ 150 m est la profondeur approximative de la zone active d'écoulement de l'eau souterraine, on fixe le paramètre à une valeur plus élevée, $\alpha_{\mathrm{L.AR}}$ = 5 m, en utilisant ici la relation empirique

établie par l'auteur pour les roches sédimentaires carbonatées (Schulze-Makuch, 2005). Pour la dispersivité transversale (α_{T}), sans importance ici étant donné la nature ~1Dz du modèle numérique, une valeur très faible est utilisée : α_{T} = 0.01 m.

Afin de simuler l'advection de l'eau à travers le modèle ~1Dz, un flux de fluide transitoire est imposé à la base du modèle (correspondant à une profondeur de 20 m dans l'AR) à partir d'une série temporelle $q_{\mathrm{f.AR}}(t)$. Cette série temporelle a été préparée en analysant les résultats du modèle D1 (en 2Dxz) présenté dans la Section 5.D, plus précisément en extrayant les flux de Darcy (q_{f}) simulés à l'interface entre l'AA et l'AR sous-jacent, puis en ajustant ensuite une courbe de régression non linéaire sur les données de q_{f} , t extraites. Le modèle empirique suivant, décrivant le flux d'eau à travers l'AA au cours du temps sous la forme d'une combinaison d'exponentielles, a ainsi été obtenu : $q_{\mathrm{f.AR}}(t) = \max(3.0 \times 10^{-9} \cdot e^{-0.025t} + 2.5 \times 10^{-11} \cdot e^{-0.0006t} + 1.5 \times 10^{-12} \cdot e^{-0.0001t}, 4.0 \times 10^{-13})$ [m/s], où t est le temps exprimé ici en années [a]. Un scénario de décroissance ~exponentielle paraît effectivement plausible considérant l'effet d'imperméabilisation lié à l'épaississement de l'AA. Ce modèle empirique demeure néanmoins une stratégie simpliste pour aborder le problème de l'advection, puisqu'il ne peut représenter véritablement le processus de transport convectif induit par les effets de la densité variable. Celui-ci sera simulé de façon plus représentative en Section 5.D.

À l'instar des étapes de modélisation de la section précédente (modèles A1 et A2), on cherche toujours à caler le modèle au profil vertical de salinité observé aujourd'hui au site de Varennes (Desaulniers & Cherry, 1989) en ajustant (au besoin) les paramètres c_{swref} ainsi que t_{swchg}.

Résultats

Un bon calage a été obtenu en conservant les valeurs précédemment choisies pour décrire l'évolution de la salinité des eaux inondantes marines dans le modèle A2 : c_{swref} = 24 g/L, et t_{swchg} = 1.5 ka. Cela signifie donc que le transport advectif de salinité depuis la surface jusqu'à l'AR en passant à travers a en fait très peu d'impact sur la salinité de l'AA longtemps après l'épisode marin.

Les résultats de la simulation numérique réalisée à partir du modèle B1 calé sont présentés dans la Figure 48 ci-après. Les profils simulés dans l'AA (Figure 48b) sont très similaires à ceux simulés par le modèle précédent, A2 (Figure 47b). En fait, l'évolution spatiotemporelle de la salinité au sein de l'AA (Figure 48a) est pratiquement identique à celle obtenue avec le modèle A2 (Figure 47a). Cette similitude s'applique d'ailleurs aussi aux transferts de masse de l'AA vers la surface (Figures 48c et 47c). Des différences liées à l'introduction du processus advectif sont tout de

même notées. L'évolution simulée dans l'AR est totalement différente de celle obtenue précédemment. Ici, le transport dispersif joue un rôle minime sur la salinisation de l'aquifère, et c'est plutôt le transport advectif descendant qui remplit, très rapidement, l'AR par des eaux salées (Figure 48a,b). Ce transfert advectif, lié à l'entraînement densitaire, est toutefois de courte durée. En termes de transferts de masse, la composante advective du transport de la salinité domine clairement les autres processus de transport considérés ici pendant la première partie de l'épisode marin (de 0.0 à 1.5 ka) durant laquelle la salinité marine demeure maximale. Mais à partir du moment où la salinité marine amorce sa diminution rapide (à 1.5 ka), c'est la composante diffusive qui domine la composante advective, en termes de flux de masse dirigés vers la surface, et ce, au moins jusqu'au temps actuel (Figure 48c). Au niveau de la base de l'AA, les transferts de masse destinés à l'AR se font essentiellement par advection et surtout au cours des premières centaines d'années (Figure 48c,d). Beaucoup plus tard, à partir de 10 ka environ, des flux dispersifs ascendants viennent concurrencer les flux advectifs descendants alors rendus très modestes (Figure 48c : les flux ascendants y sont décrits par la courbe bleue pointillée).

En somme, l'importance des composantes advective et dispersive (ou surtout diffusive, dans le cas de l'AA, en raison de sa très faible K_{AA}) diffère selon l'interface considérée : à l'interface AA–AR, les flux de salinité sont contrôlés par l'advection et destinés à l'AR, tandis qu'à l'interface AA–surface, les flux de masse restent dominés par une diffusion vers le haut malgré l'advection descendante du fluide (Figure 48c). Le fort contraste entre ces deux dynamiques peut être expliqué en bonne partie par les diffusivités contrastées de l'AA et de l'AR.

Dans leur globalité, les résultats de la Figure 48 montrent que l'action d'un écoulement d'eau d'intensité décroissante — simulé ici de façon simpliste en imposant un flux d'eau vertical transitoire $q_{\mathrm{f.AR}}(t)$ à travers le modèle sans toutefois considérer explicitement les effets de la densité variable du fluide — à travers l'AA n'entraîne pas une extraction accrue du stock de salinité de l'AA aux temps avancés. La raison principale en est que le flux $q_{\mathrm{f.AR}}(t)$ considéré décroît très rapidement. Malgré cela, les résultats de la Figure 48a,b mettent en évidence la continuité permanente entre les salinités de la partie inférieure de l'AA et celles de la partie supérieure de l'AR, soulignant ainsi l'influence majeure du transport diffusif ascendant dans l'AA sur l'évolution tardive des salinités dans l'AR sous-jacent. Étant donné la simplicité du modèle utilisé ici, toutefois, il demeure plus prudent d'attendre les résultats des modèles 2Dxz présentés en Section 5.D (qui considèrent les effets de la densité variable) avant de conclure quant aux rôles et à l'importance du transport advectif dans le problème à l'étude.

En outre, la poursuite de la simulation longtemps au-delà du temps actuel ($t > 13$ ka) a permis d'évaluer le temps nécessaire avant que la salinité maximale au sein du système modélisé ne passe sous le critère d'une concentration en matières dissoutes totales (MDT / "TDS") de 4000 mg/L utilisé au Québec « pour définir l'eau souterraine potentiellement utilisable pour la consommation et les activités humaines » (Lefebvre & Raynauld, 2017). De cet exercice exploratoire a émergé le constat suivant : il faudra patienter encore un très long temps, soit environ 25 ka, avant que l'AR présente enfin des salinités inférieures à 4 g/L rendant possible l'utilisation de ses eaux pour les activités humaines.

Cette deuxième étape de modélisations apporte d'intéressantes perspectives sur l'importance du processus convectif au sein du système aquifère régional, mais le modèle proposé (B1) reste trop simple, tant en termes de géométrie (~1Dz) que de processus considérés, pour permettre de saisir adéquatement les incidences systémiques des effets de la densité variable. Les flux de masse associés à l'entraînement densitaire et à la convection en général (libre ou forcée) ont pourtant, en toute vraisemblance, un impact non négligeable sur l'évolution du stock de salinité dans l'AA, au moins dans sa portion inférieure en contact avec l'AR. Il demeure donc pertinent de réaliser une modélisation plus élaborée du problème qui simule en 2D le transport convectif dans le SAR. Ces modèles plus complets sont présentés en quatrième et dernière étape de modélisations numériques (Section 5.D). Mais avant, un autre duo de processus couplés mérite une attention toute particulière : la sédimentation-consolidation (S&C).

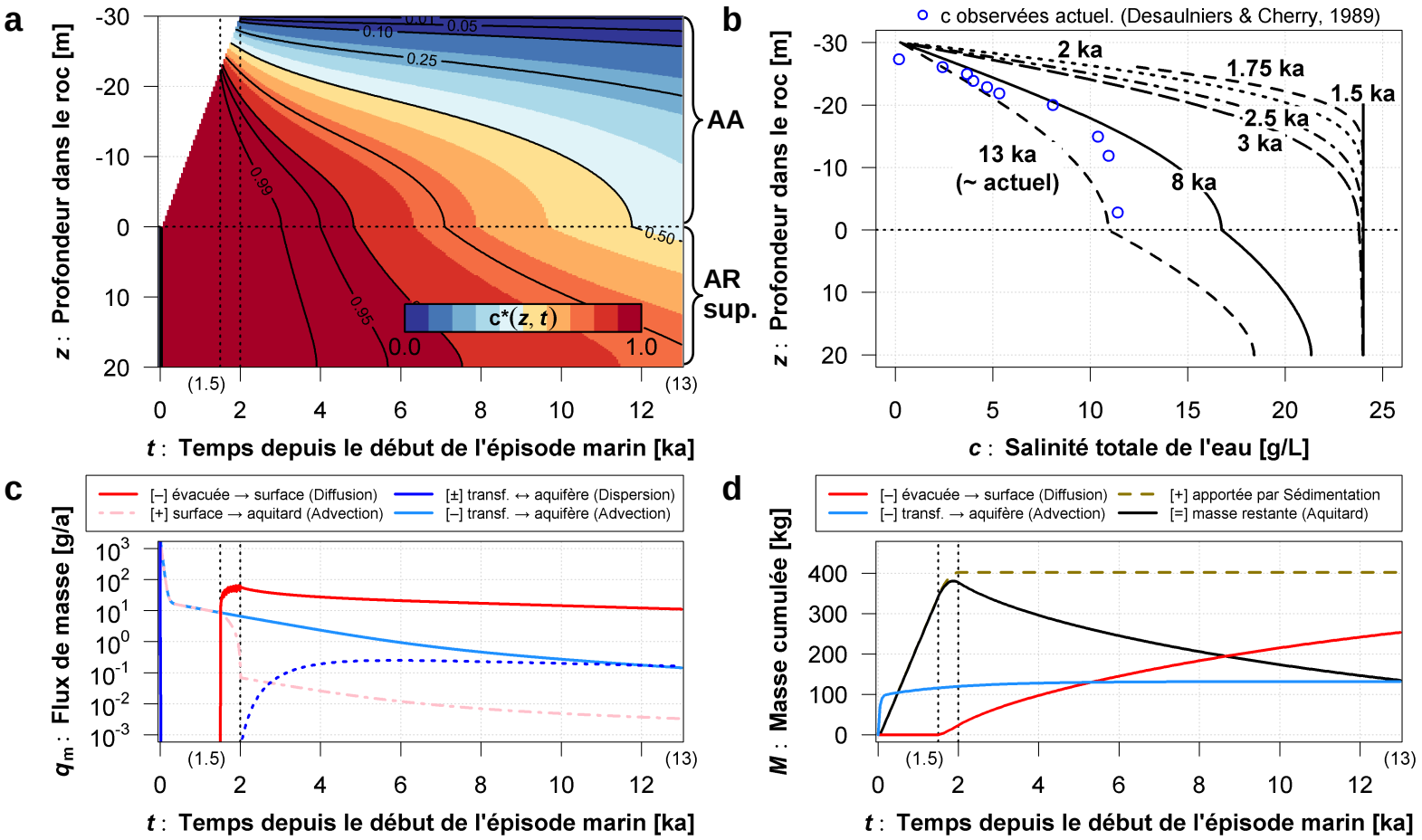


Figure 48 : Résultats du modèle B1 : Constitution du stock de salinité pendant la formation de l'AA et transport advectif-dispersif strictement vertical de cette salinité de l'AA, vers la surface et vers l'AR supérieur, du début de l'épisode marin (*t* = 0 ka) jusqu'à aujourd'hui (*t* = 13 ka). (a) Évolution de la salinité relative à l'intérieur de l'AA, en fonction de la profondeur dans l'AR et du temps. (b) Profils verticaux de salinité à sept temps choisis, dont un profil pour le temps actuel (*t* = 13 ka) qui est comparé au profil discontinu de salinités observées au site de Varennes par Desaulniers & Cherry (1989). (c) Évolution des flux de masse advectifs et dispersifs à travers le toit et la base de l'AA. (d) Évolution de la masse accumulée maximale en absence de tout autre transfert, de la masse totale restante dans l'AA, de la masse cumulative évacuée de l'AA vers la surface (surtout par diffusion) et de la masse cumulative transférée de l'AA vers l'AR (surtout par advection). L'intervalle de salinités utilisé dans cette simulation est 0.250 g/L ≤ c ≤ 24.0 g/L. Début et fin de l'épisode marin à *t* = 0 et *t* = 2 ka ; déclin de la salinité marine à partir du temps seuil t_{swchg} = 1.5 ka.

5.C Processus hydromécaniques et transport advectif 1D liés à la sédimentation-consolidation de l'aquitard

Dans cette troisième étape de modélisations numériques, nous examinons les incidences hydrogéologiques liées à la sédimentation-consolidation (S&C) de l'aquitard argileux (AA) pendant sa formation. La S&C nous est apparue comme un processus pouvant potentiellement générer des flux d'eau assez importants pour qu'ils ne soient pas négligeables. Cette troisième étape de modélisation a donc été réalisée dans le but de vérifier si les flux liés à la S&C étaient significatifs ou non.

Modèles C1 et C2 : Expulsion de l'eau et de la salinité de l'aquitard sous l'effet de la sédimentation-consolidation (S&C)

Approche de simulation

Un simulateur d'écoulement numérique a été programmé en langage R. Ce modèle 1Dz implémente une version modifiée de la solution numérique formulée par Wangen (1992) (voir Annexe A8.1) qui permet de simuler les couplages fortement non linéaires entre les phénomènes de croissance de la contrainte effective, de réduction de la porosité et de diminution de la K des sédiments au cœur d'une couche sédimentaire en cours de formation. Au processus de S&C est associé une augmentation de la pression de l'eau au cœur de l'AA en formation, laquelle installe peu à peu des « surpressions » ("excess pressures", en anglais) se démarquant du profil d'équilibre hydrostatique (Wangen, 1992). Ces surpressions forment des gradients hydrauliques (verticaux) conséquents qui permettent en fait d'évacuer les eaux interstitielles provenant de la part de porosité perdue en cours de consolidation du milieu poreux. Pour les fins de l'étude, le modèle original de Wangen (1992) a été adapté de façon à pouvoir mettre en jeu un taux de sédimentation variable dans le temps. Ainsi, il est possible avec notre programme R de simuler la S&C dans l'AA en utilisant un scénario à taux de sédimentation constant s_{a} ou variable $s_{\mathrm{a}}(t)_{nlin}$ — taux déjà définis dans la conceptualisation du problème (en Section 4.4.2). L'équation différentielle résolue par le programme de simulation numérique est :

$$\left(\frac{\partial p_{\mathrm{e}}}{\partial t}\right)_x - \frac{x \cdot \omega(t)}{\zeta^*(t)}\frac{\partial p_{\mathrm{e}}}{\partial x} + \left(\frac{de}{dp_{\mathrm{s}}}\right)^{-1}\frac{1}{[\zeta^*(t)]^2}\frac{k_0}{\mu}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hat{k}(e)}{(1+e)}\frac{\partial p_{\mathrm{e}}}{\partial x}\right] = (\rho_{\mathrm{s}} - \rho_{\mathrm{w}})g\omega(t) \qquad (38)$$

où p_e est la surpression [Pa], t est (ici seulement) le temps depuis le début de la période de sédimentation, $\zeta^*(t)$ est l'épaisseur « sans porosité » accumulée au temps t [m], $\omega(t) \equiv s_a(t)$ est le taux de sédimentation « sans porosité » optionnellement variable dans le temps [m/s], $x \in [0,1]$ est le système de coordonnées adimensionnel vertical utilisé pour représenter le domaine en termes de hauteur de sédiments « sans porosité » normalisée [–], e est l'indice des vides [–], p_s est la contrainte effective [Pa], de/dp_s est la dérivée du terme fonctionnel $e(p_s)$ à définir en entrée et qui établit la relation hydromécanique cruciale entre porosité et contrainte effective [Pa^{-1}], $\hat{k}(e)$ est un autre terme fonctionnel à définir en entrée et qui établit, lui, la relation empirique entre la perméabilité et la porosité des sédiments (sous forme normalisée par rapport à k_0) [–], k_0 est la perméabilité de référence utilisée pour normaliser $\hat{k}$ [m^2], μ est la viscosité ici constante de l'eau [Pa·s], ρ_s et ρ_w sont la densité des grains puis de l'eau [kg/m^3], et enfin g la gravité [= 9.81 m/s^2].

La démarche mathématique complète associée au développement de cette adaptation (Équation 38) du modèle original de Wangen (1992) — incluant la traduction du problème mathématique en un algorithme de simulation numérique basé sur la méthode des différences finies — est présentée dans l'Annexe A8.1. Le code du programme R développé afin d'exécuter cet algorithme, quant à lui, est fourni en Annexe A8.3.

Des données et relations empiriques ont été trouvées dans la littérature pour paramétrer les termes fonctionnels hydromécaniques inclus dans la simulation numérique de la S&C (voir en fin d'Annexe A8.1 pour une description et un argumentaire plus détaillés). Le premier terme fonctionnel, $e(p_s)$, qui prédit l'indice des vides local en fonction de la contrainte effective locale (c.-à-d. à une coordonnée x donnée), a été paramétré en s'inspirant étroitement des courbes œdométriques obtenues pour des sédiments fins du fjord du Saguenay, considéré être un analogue raisonnable de la Mer de Champlain en termes de profondeurs d'eau (50 à 275 m), de granulométries déposées et de stratification en température et salinité (Perret *et al.*, 1995). Le second terme fonctionnel, $\hat{k}(e)$, qui prédit la perméabilité (normalisée) locale en fonction de la porosité locale, a été paramétré en se basant sur des courbes empiriques de référence publiées pour décrire des argiles typiques du Québec incluant celles de la Mer de Champlain (Tavenas *et al.*, 1983). Une densité des grains de ρ_s = 2750 kg/m^3 a été retenue puisque caractéristique des argiles de la Mer de Champlain (Leroueil *et al.*, 1983). Enfin, une porosité maximale de n_0 = 0.80 (soit e_0 = 4.0) a été prise comme valeur de référence représentant la couche superficielle de l'AA où la contrainte effective est minimale en raison de l'absence de sédiments sus-jacents ; cette valeur élevée repose sur une étude de la consolidation des sédiments fins déposés dans une mer profonde (Bayer & Wetzel, 1989, leur Fig. 3).

Deux scénarios de paléoconditions d'interface sont testés. Dans le scénario du modèle C1, l'aquitard argileux (AA) se forme selon un taux de sédimentation constant spécifié par $\omega = s_{\mathrm{a}}$ = 0.5 cm/a. Dans le scénario du modèle C2, la formation de l'AA se concentre davantage au début de l'épisode marin, avec un taux de sédimentation variable spécifié par $\omega(t) = s_{\mathrm{a}}(t)_{nlin}$ et débutant à un taux initial de s_{a0} = 1.6 cm/a, toujours « sans porosité » (définitions en Section 4.4.2). Dans les deux cas, l'épaisseur « sans porosité » à atteindre à la fin de la période de sédimentation est identique et fixée à $b_{\mathrm{a.act}}$ = 9.75 m.

La stratégie de calage du modèle de S&C consiste à s'assurer que les K_{AA} et les $n_{\mathrm{tot.AA}}$ simulées pour des temps $t \geq 2$ ka soient semblables aux valeurs observées pour ces propriétés dans l'AA choisi comme référence dans notre étude (site de Varennes). Des valeurs de K_{AA} de l'ordre de 0.5 à 2×10^{-9} m/s, et de $n_{\mathrm{tot.AA}}$ entre 0.60 et 0.70, sont ainsi ciblées (pour l'AA simulé).

Il est important en outre de souligner que ce modèle ne simule pas le transport de masse. Les transferts de salinité seront donc estimés à partir de la solution d'écoulement, en assumant que le transport advectif domine les autres processus de migration de la salinité, par exemple la diffusion, durant toute la période de sédimentation active (soit tant que $\omega > 0$). Aussi, la densité variable de l'eau est-elle négligée, le modèle étant de toute façon unidimensionnel (1Dz) et donc inadapté pour aborder le phénomène de convection libre. Malgré sa simplicité, ce modèle devrait néanmoins permettre d'évaluer l'importance potentielle du rôle de la S&C dans la migration de la salinité de l'AA vers la surface et, plus intéressant encore, vers l'AR.

Le simulateur numérique produit deux grandes familles de résultats. D'une part, il simule la variation spatiotemporelle des propriétés hydrauliques actives dans le problème de S&C : $K_{\mathrm{AA}}(z,t)$, $n_{\mathrm{tot.AA}}(z,t)$ et, implicitement, $S_{\mathrm{s.AA}}(z,t)$. D'autre part, il prédit les flux advectifs à l'intérieur du modèle 1Dz (adimensionnel), y compris à ses extrémités, donc à travers la base et le toit de l'AA. Les flux de masse, quant à eux, sont approximés en assumant que la salinité de l'eau interstitielle expulsée est toujours égale à la salinité précoce (maximale) de la Mer de Champlain, soit $q_{\mathrm{m.z}}(z = \mathrm{toit|base}, t) = q_{\mathrm{f.z}}(z = \mathrm{toit|base}, t) * c_{\mathrm{swref}}$, sans considérer ici la diminution tardive (associée au paramètre t_{swchg}) de la salinité des eaux marines sus-jacentes.

Résultats

En un premier temps, la Figure 49 résume graphiquement l'évolution interne des conditions de pression et des propriétés hydrauliques dans l'aquitard argileux (AA). Les graphiques de la Figure 49 permettent de visualiser et d'ainsi comprendre l'essentiel de la dynamique et des interactions entre les différentes composantes hydromécaniques et hydrogéologiques impliquées dans le

processus de S&C. On y perçoit d'abord l'épaississement de l'AA au cours du temps, en suivant les ronds indiquant la position du toit de l'AA à différents moments. Ensuite, on note la forme en cloche des profils verticaux de surpression au sein de l'AA en formation (Figure 49a). On remarque aussi que les surpressions maximales sont atteintes relativement tôt (t ~ 0.8 ka) avec le modèle C2 (à taux variable), alors qu'elles augmentent sans cesse jusqu'à la fin de la période de sédimentation active (t ~ 2.0 ka) avec le modèle C1 (à taux constant) et atteignent ainsi des valeurs de surpression plus élevées que le modèle C2. De plus, on constate que les profils verticaux de porosité totale aux différents temps sont en fait tous équivalents à cela près qu'ils amorcent leur décroissance à des positions (de toit de l'AA) différentes (Figure 49b). Les profils verticaux de conductivité hydraulique, quant à eux, ne s'équivalent pas, bien qu'ils semblent à première vue présenter des courbures similaires (Figure 49c). Enfin, la Figure 49 dans son ensemble met en évidence la grande variabilité ainsi que la forte dépendance à la profondeur des conditions de pression et des propriétés hydrauliques au sein de l'AA.

En un second temps, les résultats simulés par les modèles C1 et C2 sont présentés sous forme graphique, en termes de flux de masse (q_{m}) et de masses cumulées (M), puis interprétés (Figure 50). Tout d'abord, ces résultats révèlent que les flux de masse (q_{m}) advectifs induits par la S&C à travers le toit de l'AA sont importants et qu'ils dominent les q_{m} diffusifs et même ceux liés à l'advection densitaire 1Dz — tels qu'évalués dans l'étape de modélisation précédente (modèle B1) et notés par "Adv." dans la Figure 50 — pendant presque toute la période de sédimentation : de t ≈ 0.14 à 2.01 ka dans le scénario C1, ou de t ≈ 0.08 à 1.71 ka dans le scénario C2 (Figure 50b). Au niveau de la base de l'AA, les q_{m} advectifs induits par la S&C sont d'environ un ordre de grandeur inférieurs aux q_{m} advectifs-densitaires du modèle B1. De plus, ils semblent atteindre assez rapidement un plateau dans le scénario C1, tandis qu'ils poursuivent une diminution (exponentielle) continuelle d'environ un ordre de grandeur dans le scénario C2 (Figure 50b). L'infériorité des q_{m} advectifs au niveau de la base par rapport à ceux au niveau du toit de l'AA est due au fait que la K_{AA} est fortement réduite dans la portion inférieure de l'AA par rapport à sa partie supérieure, la consolidation des sédiments y étant plus aboutie (voir Figure 49). On remarque, de plus, que les q_{m} associés à la S&C deviennent négligeables très peu de temps (< 0.2 ka) après la fin des apports en sédiments et ce, peu importe le scénario (Figure 50b).

D'autre part, les courbes de masses cumulées illustrent clairement l'accumulation d'un important stock de salinité dans l'AA, atteignant finalement environ 480 kg (/m^2) une fois l'AA entièrement formé (Figure 50b). Le stock de salinité simulé ici s'avère donc ~25 % supérieur au stock de salinité maximal obtenu avec le modèle B1. Cela s'explique par le fait que dans les modèles C1

et C2 considérant la S&C, la porosité simulée de l'AA varie avec la profondeur (voir Figure 49b) et s'avère dans l'ensemble plus importante que la porosité uniforme considérée dans les modèles antérieurs — qui était fixée à $n_{\mathrm{tot.AA}}$ = 0.64. Cet écart important de stock de salinité paraît lié à notre choix méthodologique de caler la porosité finale moyenne évaluée seulement pour la partie inférieure de l'AA, à la valeur de référence ciblée, $n_{\mathrm{tot.AA}}$ = 0.64, malgré le fait que les résultats de la Figure 49b indiquent clairement que les porosités finales de la partie supérieure de l'AA (simulé en considérant la S&C) sont toutes supérieures à 0.64. Ceci met ainsi en évidence une limite importante du présent exercice de modélisation de la S&C, à savoir qu'il est difficile de contraindre l'état final de consolidation (et donc la porosité ainsi que la conductivité hydraulique) de la portion supérieure de l'AA simulé à partir des informations limitées dont on dispose sur l'état contemporain de l'AA réel choisi comme référence (site de Varennes), principalement en raison des nombreuses hypothèses simplificatrices adoptées ici pour aborder le problème de la S&C (voir Section 4.3.3).

En outre, une simple comparaison visuelle des courbes de masses cumulées obtenues avec chacun des deux scénarios (Figure 50d) permet de constater que les masses cumulées en lien avec la S&C sont finalement égales (une fois les surpressions interstitielles dissipées) peu importe le scénario utilisé pour décrire l'évolution temporelle du taux de sédimentation. De même, on remarque la forte corrélation entre les courbes de flux de masse q_{m} et de taux de sédimentation s_{a} à partir de $t \approx 0.3\ \mathrm{ka}$, d'une part (Figure 50b,a), et entre les courbes de masse restante M et d'épaisseur sans porosité b_{a}, d'autre part (Figure 50d,c).

Enfin, on peut comparer les contributions massiques cumulatives destinées à l'AR apportées par la S&C ou par l'advection densitaire — telle qu'approximée dans l'étape de modélisation précédente (B1) — en se rapportant aux graphiques des masses cumulées au cours du temps (Figure 50d). On constate alors que la masse cumulative finalement transférée à l'AR par expulsion des eaux interstitielles de l'AA par S&C (courbes bleues en trait continu) est environ deux fois moindre que celle transférée à l'AR par advection densitaire (B1). Différemment, au toit de l'AA, la masse cumulative évacuée vers la surface par S&C (courbe rouge en trait continu) domine largement la masse transférée par diffusion (courbe rouge pointillée : de B1). Ces résultats montrent ainsi que le processus de sédimentation-consolidation peut jouer un rôle important dans l'invasion de l'AR par les eaux marines, du moins tant que les conditions transitoires de pression dans l'AA tout au long de sa formation sont effectivement proches d'un équilibre hydrostatique (tel que considéré dans les modèles C1 et C2 présentés ici). En effet, dans le cas contraire où l'équilibre hydrostatique des limites de l'AA ne serait pas respecté, par exemple

en considérant la diminution rapide du niveau d'eau relatif décrite par $NER(t)$ et les forts gradients hydrauliques verticaux (charges hydrauliques décroissant vers la surface) induits dans l'AA, la répartition entre les quantités d'eau (et donc de salinité) expulsées vers l'AR / vers la surface s'en trouverait grandement modifiée — à l'avantage des flux destinés à la surface. À noter toutefois : aucune des modélisations numériques présentées dans cette étude n'a simulé la S&C en conditions « non hydrostatiques » ; ce problème reste donc à investiguer.

En somme, cette comparaison des flux de masse et masses cumulées entre les modèles C1 / C2 et B1 doit être considérée exploratoire, et non conclusive, en raison des nombreuses simplifications apportées au problème abordé : d'une part, la diminution rapide du $NER(t)$ n'est pas considérée dans les modèles C1 / C2 ; d'autre part, la composante « advective-densitaire » imposée au modèle B1 est simpliste et excessivement découplée déconnectée de la dynamique convective intrinsèquement multidimensionnelle de l'AR. C'est pourquoi il vaut mieux recourir aux résultats de l'étape de modélisation suivante (Section 5.D) avant de conclure quant à l'importance des transferts convectifs à l'interface AA–AR.

Néanmoins, cet exercice de modélisation de la S&C s'avère tout à fait pertinent et fructueux. En effet, il a mené au développement d'outils de simulation flexibles et opérationnels permettant d'explorer, tester et finalement déterminer l'incidence de plusieurs scénarios de sédimentation plausibles sur l'évolution des propriétés hydrauliques de l'AA ainsi que sur le transfert de salinité de l'AA vers l'AR sous-jacent dû au processus de S&C. À notre connaissance, c'est la première fois que le processus de S&C est considéré puis simulé numériquement dans le cadre d'une étude paléo-hydrogéologique s'intéressant à l'évolution d'un système aquifère régional ayant connu un épisode prolongé d'invasion marine postglaciaire.

La prochaine et dernière étape de modélisations va ajouter une deuxième dimension spatiale au problème, intégrer les effets de la densité variable et représenter l'AR plus complètement, en plus de tenir compte de l'ensemble des paléoconditions reconstituées préalablement lors de la conceptualisation du problème.

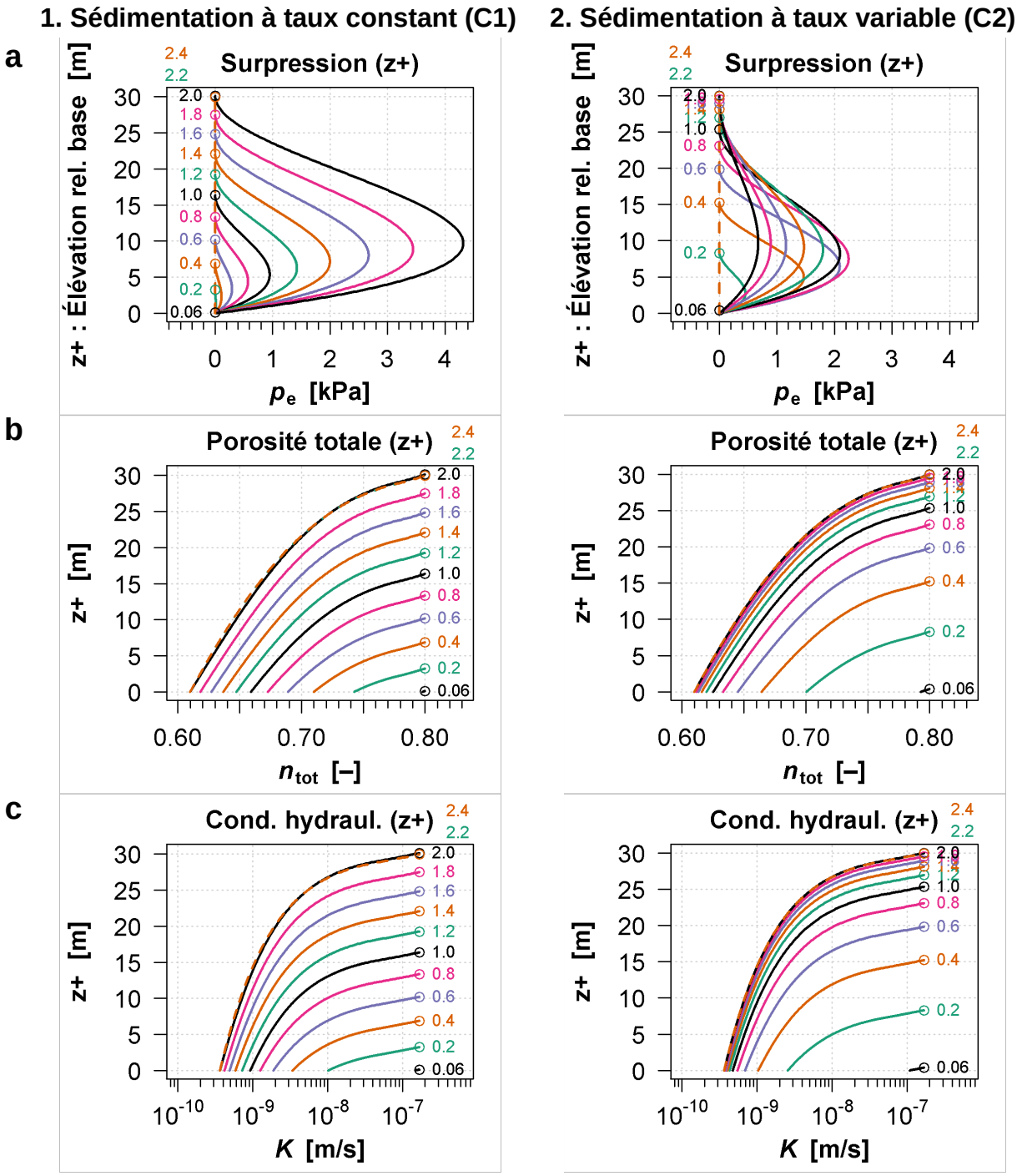


Figure 49 : Résultats « hydromécaniques » des modèles C1 et C2, illustrant l'évolution des surpressions et des propriétés dans l'AA causée par le processus de sédimentation-consolidation, du début de la période de sédimentation active (*t* = 0.05 ka) jusqu'à 0.5 ka après la fin de la sédimentation (*t* = 2.5 ka). Profils verticaux : (a) de surpression, (b) de porosité totale et (c) de conductivité hydraulique dans l'AA, à différents temps pendant (≤ 2.0) puis après (> 2.0) sa formation. Les profils sont dressés en fonction de l'élévation réelle au sein de la colonne de sédiments argileux en formation, c'est-à-dire en considérant la porosité variable des sédiments. Les ronds indiquent la position du toit de l'AA à chaque temps. Le temps *t* associé à chaque profil est inscrit à côté de son rond et exprimé relativement au début de l'épisode marin (en ka).

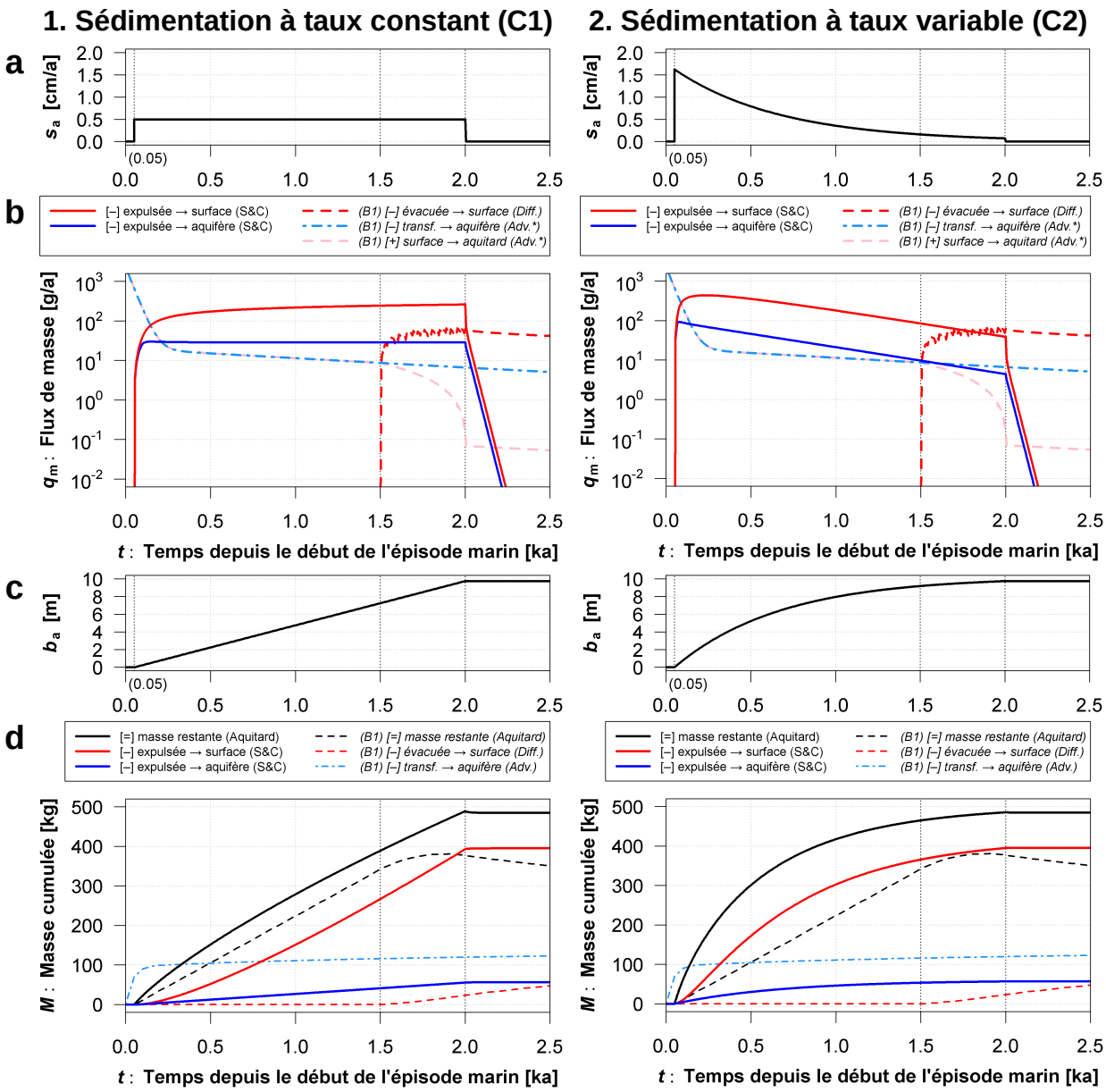


Figure 50 : Résultats « massiques » des modèles C1 et C2 : Constitution du stock de salinité pendant la formation par sédimentation-consolidation de l'AA et transport purement advectif et strictement vertical de cette salinité, par expulsion de l'eau interstitielle de l'AA vers la surface et vers l'AR supérieur, du début de l'épisode marin (*t* = 0.0 ka) jusqu'à 0.5 ka après la fin de la sédimentation. (a) Taux de sédimentation variable au cours du temps : $s_a(t)$. (b) Évolution des flux de masse advectifs vers la surface (en rouge) et vers l'AR (en bleu), incluant des courbes de résultats obtenus avec le modèle B1 (en pointillés) fournies à titre comparatif. (c) Hauteur de sédiments (sans porosité) accumulés au cours du temps : $b_a(t)$. (d) Évolution de la masse totale restante dans l'AA à mesure qu'il se forme et se consolide, de la masse cumulative expulsée de l'AA vers la surface (en rouge) et vers l'AR (en bleu) par l'advection induite par la S&C, et courbes des résultats simulés avec le modèle B1 (en pointillés). La période de sédimentation active s'étend de *t* = 0.05 jusqu'à *t* = 2 ka. Une salinité constante de 24 g/L est assumée pour calculer l'ensemble des flux de masse des modèles C1 et C2. Par conséquent, le déclin tardif de la salinité marine à partir du temps seuil t_{swchg} = 1.5 ka n'a aucun effet sur les résultats spécifiques à C1 / C2, alors même qu'il a fortement influencé les résultats du modèle B1, dont ceux reproduits ici.

5.D Simulation 2D de l'invasion marine à travers l'aquitard et dans le système aquifère rocheux

Cette quatrième et dernière étape de modélisations numériques vise à simuler l'évolution spatiotemporelle de l'état du système aquifère régional entier, c'est-à-dire autant l'état de l'aquifère rocheux régional (AR) que celui de l'aquitard argileux (AA). On s'intéresse ici aux trois types (définis plus haut) de convection des eaux souterraines (libre, forcée, mixte) autant qu'à la migration de la salinité, le tout en régime transitoire et de façon continue sur toute la période investiguée ($t \in$ 0 à 13 ka). L'étude des processus couplés d'écoulement et de transport convectifs est rendue possible par l'utilisation d'une représentation en coupe verticale (2Dxz) du système aquifère régional entier.

Cet exercice vise en premier lieu à apprécier l'importance spatiale et massique des divers processus intervenant dans la formation de l'AA, l'invasion puis le lessivage de l'AR, et d'identifier les facteurs internes et externes déterminants. De plus, il devrait permettre de contribuer à la résolution de la controverse — bien décrite par Benabdallah (2010) — entre les thèses d'une diffusion dominante versus d'une advection dominante dans l'AA, amenées respectivement par Desaulniers & Cherry (1989) versus par Woodley (1996). Cette ultime étape de modélisations numériques est d'ailleurs basée sur une hypothèse de départ similaire à celle formulée dans Benabdallah (2010), à savoir que l'invasion puis la migration de la salinité dans le système aquifère régional se fait à la fois par transport diffusif et par transport advectif-dispersif, y compris dans l'AA. Bien que cette hypothèse ait déjà été explorée par cet auteur, l'exercice de modélisation 2Dxz présenté ici demeure pertinent, puisque les effets de la densité variable et le transport convectif associé n'ont pas du tout été considérés dans ses modélisations numériques (Benabdallah, 2010). En outre, le système aquifère représenté dans leurs modèles conceptuels et numériques est d'échelle locale (~30 km^2 ; ~20 m de profondeur dans le roc), alors que nos travaux s'intéressent à l'échelle régionale (>1000 km^2 ; ~1000 m de profondeur dans le roc).

Modèles D1 et D2 : Transport convectif de la salinité dans le système aquifère régional entier

Approche de simulation

Dans le logiciel FEFLOW, un modèle numérique en coupe verticale 2Dxz est construit selon une géométrie fort semblable à celle du modèle conceptuel présenté plus tôt (voir Figure 45 en début

de Section 4). Le modèle numérique comprend ainsi, dans sa moitié gauche, un bassin plat où s'accumulent les argiles pour former l'AA (~ Basses-terres du Saint-Laurent), et dans sa moitié droite, un relief simpliste de type colline sans accumulation d'argiles (~ Piémont appalachien). La longueur du modèle 2Dxz est de 3.0 km. Sa hauteur est de 1000 m pour le compartiment de l'aquifère rocheux, à quoi s'ajoutent jusqu'à +30 m là où se forme progressivement l'AA. L'élévation zéro (de référence) considérée dans le modèle numérique est fixée à la base de l'AR, plus précisément dans le coin inférieur gauche du modèle. Le symbole « y » est utilisé pour désigner une telle élévation, tandis que le symbole « z » demeure réservé à la désignation d'une « profondeur dans l'aquifère rocheux ». Le toit du roc a une élévation constante de y = 1000 m sur les premiers 1.4 km en partant de l'extrémité gauche (nord-ouest) du modèle. De x = 1.4 à 1.6 km, son élévation augmente linéairement jusqu'à y = 1030 m. La zone ainsi définie, allant de x = 0.0 à 1.6 km, constitue le bassin de sédimentation des fines de la Mer de Champlain. L'épaisseur finale visée pour l'AA dans ce bassin étant de 30 m, l'élévation finale prévue du toit de l'AA est préétablie à une valeur de y = 1030 m dans sa partie plane, tandis qu'elle est rehaussée linéairement jusqu'à y = 1032 m en son extrémité droite (sud-est) afin de ne pas obtenir d'éléments finis trop exigus lors de la discrétisation du modèle. Pour la moitié droite du modèle, soit de x = 1.6 à 3.0 km, le toit du roc est défini au moyen d'une solution analytique prédisant l'élévation d'une nappe libre entretenue par une recharge constante (fixée à 50 mm/a) et bordée seulement à sa limite gauche (ici l'extrémité sud-est de l'AA, à x = 1.6 km) par un point d'émergence. L'élévation ainsi préparée pour le toit du roc à l'extrémité droite du modèle est de y ≈ 1067 m. La moitié droite approxime ainsi l'amorce des reliefs de plus en plus élevés du Piémont appalachien.

Le modèle est discrétisé en 33880 éléments quadrangulaires. Il a été constaté qu'un maillage fin était nécessaire malgré l'échelle régionale du problème pour obtenir une solution numérique non divergente et de qualité acceptable pour les fins de cette étude : la largeur des éléments est ainsi de l'ordre de 5–10 m. Le domaine est discrétisé plus finement à proximité du toit de l'AR, où le transport convectif-dispersif et les gradients de h et de c les plus forts sont attendus. Cependant, en raison de limitations techniques dues entre autres choses à l'utilisation d'éléments quadrangulaires, et aussi afin d'éviter une trop lourde augmentation des temps de calcul, l'affinage du maillage n'est fait que dans cette zone du système autour du toit de l'AR, et seulement verticalement.

Le compartiment rocheux est fixe, tant du point de vue de sa géométrie que de ses propriétés hydrauliques. Quant à l'AA, il voit sa géométrie effective et sa conductivité hydraulique modifiées

au cours de la simulation, de façon à reproduire au mieux les changements prédits par le modèle C1 de l'étape précédente.

Pour simuler le processus d'épaississement de l'AA tout au long de la période de sédimentation, il a été décidé de discrétiser l'AA « actuel » — c'est-à-dire dans sa géométrie finale — en un assez grand nombre de couches numériques qui sont progressivement activées. Il est possible, en effet, d'ajouter des éléments au domaine modélisé en cours de simulation, dans FEFLOW. Il suffit alors d'assigner aux nœuds et éléments nouvellement activés des propriétés hydrauliques et conditions initiales adéquates.

Du point de vue des processus hydrogéologiques, les modèles numériques de cette étape D considèrent l'écoulement de l'eau, le transport de masse et les effets de la densité variable de façon couplée. Ce couplage permet notamment de simuler la convection libre explicitement.

« PaleoSea2D », un *plugin* de type "IFM" programmé par les auteurs expressément pour cette famille de simulations paléo-hydrogéologiques en 2Dxz, vient gérer tous les aspects transitoires du problème, c'est-à-dire tous les changements devant être appliqués aux limites extérieures du modèle ou encore aux propriétés élémentaires ou nodales à l'intérieur du modèle en cours de simulation. La majorité de ces changements sont dictés par des séries temporelles jointes au modèle. Le *plugin* gère notamment les aspects suivants :

1. La traduction des séries temporelles décrivant les paléoconditions de surface et d'interface en conditions aux limites transitoires et l'application de ces dernières aux nœuds du toit actif du modèle. Le *plugin* détermine quelles zones du toit du système aquifère régional sont inondées ou sinon émergées. Les conditions de charge (h) et de salinité (c) imposées aux nœuds du toit inondés sont alors liées aux conditions du plan d'eau inondant (charge équivalente et salinité), tandis que les conditions imposées aux nœuds du toit émergés sont déterminées par la surface topographique telle que fixée par la géométrie du toit du modèle (~ sol) et les paléoconditions de surface intemporelles associées, de sorte que : $h = z$ (nappe libre fixée au niveau du sol) et $c = c_{\mathrm{fw}}$ (salinité constante des eaux pluviales). Le *plugin* tient compte de la densité des eaux marines pour préparer les valeurs des h équivalentes à imposer aux nœuds du toit inondés.
2. De plus, à la fin de chaque pas de temps, le *plugin* note la direction de la composante verticale du flux de fluide en chaque nœud du toit du modèle. Au cours du pas de temps suivant, il n'assigne une condition de c fixée qu'aux nœuds du toit qui montraient un flux entrant (c.-à-d. $q_{\mathrm{f.z}} < 0$ m/s). Sinon, le nœud « sortant » acquiert la condition par défaut de

flux de masse dispersif nul forcé (ex. Pool *et al.*, 2015). Il y a toutefois une exception à cette procédure, concernant l'AA : une c fixée est imposée aux nœuds du toit de l'AA peu importe le $q_{\mathrm{f.z}}$ simulé à partir du moment où l'AA a atteint une épaisseur donnée, ceci afin de tenir compte du fait que les flux diffusifs devraient de toute façon dominer les flux convectifs à partir de ce moment seuil, en raison de la K réduite de l'AA.

3. Le *plugin* active progressivement les couches d'éléments représentant la géométrie finale de l'AA, en leur assignant dès lors les propriétés hydrauliques et les conditions initiales adéquates, tout en déplaçant les conditions imposées à chaque nouvelle étape d'épaississement.

4. Le *plugin* contamine les conditions de référence à imposer au toit du système par l'ajout d'instabilités stochastiques, c.-à-d. de perturbations ou « bruit » aléatoires, aux valeurs de c censées être imposées aux nœuds du toit situés dans la zone inondée par la mer. Les valeurs « bruitées » effectivement imposées à ces nœuds sont ainsi préparées au début de chaque pas de temps par : $c_i(t) = C_{\mathrm{sw}}(t) + 0.01\, C_{\mathrm{sw}}(t) * \mathrm{unif}(0.0,\ 1.0,\ n = 1)$, avec $c_i(t)$ la salinité « bruitée » à imposer au $i^{\mathrm{ième}}$ nœud inondé du toit durant le pas de temps en cours, t le temps au début du pas de temps en cours de simulation, $C_{\mathrm{sw}}(t)$ la série temporelle décrivant l'évolution de la salinité des eaux inondantes pendant l'épisode marin, et enfin, $\mathrm{unif}(\dots)$ un nombre aléatoire entre 0.0 et 1.0 (bruit blanc à distribution uniforme) renouvelé de nœud en nœud et d'un pas de temps à l'autre. Cette stratégie de simulation, tirée de Simmons *et al.* (1999), permet d'éviter que les conditions au toit du système soient numériquement égales (à un temps t donné) et, ainsi, facilite et accélère le déclenchement d'instabilités gravitaires, et donc l'entraînement densitaire, au sein du modèle. Une fois l'entraînement densitaire bien mis en route, la perturbation des conditions de c imposées aux nœuds du toit peut être arrêtée sans incidence ; c'est pourquoi il a été décidé de ne l'activer que de $t = 0$ à 10 a dans nos modèles numériques 2Dxz. Des stratégies similaires sont proposées dans d'autres études s'intéressant à la convection libre en conditions d'instabilité densitaire (Post & Simmons, 2010; Cremer & Graf, 2015).

5. Le *plugin*, en outre, calcule et exporte divers indicateurs d'intérêt résumant la distribution des conditions de h et de c à l'intérieur du modèle au fil de la simulation. Ces indicateurs comprennent notamment un suivi en continu des masses totales de salinité contenues à l'intérieur du modèle divisé expressément en plusieurs « zones de suivi ».

Des saumures ayant des salinités pouvant aller jusqu'à c_{db} = 70 g/L sont placées initialement à la base du compartiment rocheux, en suivant l'approche de mise en place par diffusion décrite lors de la conceptualisation des conditions initiales dans le système aquifère (Section 4.4.3).

Les paramètres associés au transport diffusif sont assignés suivant les simplifications et choix de valeurs présentés dans les étapes de modélisation précédentes : n_{AA} = 0.64, $D_{\mathrm{e.AA}}$ = 1×10^{-9} m^2/s ; n_{AR} = 0.01, $D_{\mathrm{e.AR}}$ = 1×10^{-11} m^2/s. L'anisotropie de la K n'est prise en compte ni pour l'AA ni pour l'AR. La conductivité hydraulique (K) de l'AA est supposée uniforme dans l'espace mais variable au cours du temps, et dictée par une série temporelle issue du modèle C1 décrivant la décroissance rapide de la K verticale équivalente (à l'échelle de l'AA entier) au cours du temps. La K de l'AR est définie en utilisant la formule empirique définie par l'Équation 34 et ajustée, pour le premier modèle D1, tel que décrit dans la conceptualisation de l'AR, avec K_{max} = 1.00×10^{-6} m/s, K_{min} = 1.00×10^{-9} m/s, λ_{D1} = 0.0256 m^{-1}, et d_0 = 10.0 m (voir Section 4.3.2). Le second modèle, D2, est en tout point identique au premier (D1), sauf pour la valeur du paramètre de décroissance λ qui est divisée par quatre, soit λ_{D2} = 0.0064 m^{-1}. Ce second modèle permet ainsi d'étudier l'effet d'une décroissance plus lente de la K de l'AR avec la profondeur — pour une même K « de départ » K_{max} au niveau du toit du roc. En outre, les paramètres suivants sont utilisés pour paramétrer la dispersion de la salinité lors de la simulation : α_{L} = 20 m ; α_{T} = 0.5 m (uniforme pour l'entièreté du domaine modélisé). À noter : le paramètre α_{L} a été déterminé en considérant l'échelle horizontale de ces modèles 2Dxz (L ~ 3 km) puis en utilisant la relation empirique entre α_{L} et L établie par Schulze-Makuch (2005) pour des roches de type carbonate.

Tout comme dans les étapes de modélisation précédentes, la visée est encore ici de reproduire au mieux les salinités observées aujourd'hui dans le système aquifère régional, non seulement dans l'AA mais désormais aussi dans l'AR supérieur (0–40 m). Les objectifs de calage considérés ici sont donc les suivants. Pour l'AA, on cherche toujours à reconstituer le profil vertical de salinité du site de Varennes, avec une salinité maximale d'environ 11.5 g/L à la base de l'AA (Desaulniers & Cherry, 1989). Pour l'AR, on tente de reproduire des c de même ordre que la salinité TDS maximale observée à l'intérieur de la zone saumâtre (dans la partie nord-ouest de la région d'étude) pour les eaux de l'aquifère rocheux, soit ~12 g/L (Beaudry *et al.*, 2018). En outre, les flux de recharge simulés dans les zones émergées sont examinés simplement afin d'en évaluer la plausibilité, étant donné l'approche de « nappe libre fixée » utilisée.

Trois valeurs différentes du paramètre de « salinité de référence de l'eau marine » (c_{swref}) sont testées dans cette dernière étape de modélisations numériques : 35 g/L (la salinité marine normale) dans les modèles principaux D1 et D2 ; 24 g/L (la salinité marine suggérée par le calage

des modèles A1, A2 et B1) dans une première variante « D1′ »; et 12 g/L (la salinité représentant un mélange de 1/3 d'eau de mer de salinité normale et de 2/3 d'eau douce) dans une seconde variante « D1″ ». Le temps seuil à partir duquel la salinité du fond marin commence à diminuer est, quant à lui, fixé à un moment plus tardif que dans les modèles antérieurs, soit : t_{swchg} = 1.8 ka. C'est l'analyse interprétative des résultats simulés par les modèles 2Dxz, présentée ci-après, qui permettra d'évaluer la plausibilité de chacun de ces trois scénarios de paléosalinité marine.

Résultats

Les simulations numériques effectuées à partir des modèles D1 et D2 produisent un volume important d'informations intéressantes et accessibles puisque bien adaptées à l'analyse visuelle. Pour les fins de l'étude, quatre formats différents ont été retenus pour la présentation graduelle des résultats des modèles 2Dxz de l'étape D : i) vues instantanées de l'état du système aquifère régional à des temps choisis ; ii) vues intégrées dans le temps de l'évolution des profils verticaux de salinité à deux localisations d'intérêt dans le système ; iii) profils verticaux de statistiques sur la salinité actuelle du système dans la zone d'eaux souterraines saumâtres, et enfin ; iv) courbes décrivant l'évolution temporelle du stock de salinité au sein de plusieurs zones dans le système.

Premièrement, les Figures 51 à 54 ci-après présentent les vues instantanées de l'état du système aquifère régional à six temps choisis au cours de la période investiguée. Les Figures 51 et 52 présentent les résultats produits par le modèle D1, tandis que les Figures 53 et 54 montrent ceux produits par le modèle D2, dans lequel la K de l'aquifère rocheux décroît plus lentement avec la profondeur. La longueur figurée dans le modèle n'étant que de 3 km, aucune exagération verticale n'est utilisée dans la présentation graphique. Il est pertinent de souligner ici qu'une vue dynamique des résultats de chacun de ces deux modèles est aussi disponible, sous forme d'animations vidéos : ces vues présentent les résultats simulés dans un fil temporel continu de t = 0 à 13 ka (voir Annexe A8.2). Bien qu'encore plus efficaces pour communiquer les résultats, ces animations ne se prêtent cependant pas à une présentation statique, d'où l'importance d'aborder dès maintenant les résultats présentés sous forme de vues instantanées.

Tout d'abord, les résultats des Figures 51 à 54 mettent en évidence le contrôle important exercé par la K de l'AR sur l'intensité et l'extension verticale de l'invasion du système par les eaux marines. Pour tous les temps choisis, le front d'invasion est significativement plus avancé dans le

modèle D2 (décroissance ralentie de la K) que dans le modèle D1 (décroissance normale de la K). Les profondeurs d'invasion atteintes au temps actuel (t = 13 ka) sont d'environ 200 m dans le modèle D1, contre 500 m dans le modèle D2. Un autre intérêt présenté par la simulation D2 est qu'elle permet d'observer plus facilement le phénomène de transport convectif. On y perçoit de vastes volumes (~doigts) d'eaux salées qui, après avoir été introduits tôt dans la simulation, migrent vers la profondeur tout en se fusionnant ou en se dispersant au fil du temps. Néanmoins, le modèle D1 demeure le scénario privilégié, puisque c'est celui dont la définition de la K(z) dans l'AR est basée directement sur les résultats de la caractérisation hydraulique du système aquifère rocheux fracturé réel (de la Montérégie Est).

Malgré leurs différences, les évolutions spatiotemporelles de la salinité dans les deux modèles suivent toutes deux une histoire commune pouvant être résumée par les étapes suivantes :

1. Tôt dans l'épisode marin (0.1 ka : vues « a »), l'invasion du compartiment rocheux par les eaux marines est rapide sur toute la longueur du modèle, y compris au niveau du bassin de la moitié gauche, qui commence tout juste à accumuler des sédiments argileux.
2. Au milieu de l'épisode marin (1.0 ka : « b »), l'invasion de l'AR dans la zone gauche où croît l'AA est très ralentie suite à l'épaississement de ce dernier (épais de 15 m à ce moment dans les modèles). Le rôle « d'obstacle » joué par l'AA ressort très clairement.
3. Vers la fin de l'épisode marin (1.9 ka : « c »), on perçoit déjà les répercussions de la diminution rapide de la salinité des eaux marines (amorcée 100 ans plus tôt). Dans la moitié droite du modèle, où il n'y a pas d'AA, cela entraîne aussitôt une migration diffusive de la salinité qui avait précédemment envahi l'AR supérieur. Dans la moitié gauche du modèle, la migration diffusive ne concerne pour l'instant que le toit de l'AA, qui connaît des diminutions importantes et rapides de sa salinité. En effet, l'AR sous-jacent n'est pas encore affecté par cet important changement des paléoconditions de salinité en surface, parce qu'il est isolé par l'épais AA — alors presqu'entièrement formé.
4. Quelque temps après l'épisode marin (3.0 ka : « d »), la réduction de masse par diffusion vers la surface se poursuit, essentiellement dans la moitié droite de l'AR et dans la partie superficielle de l'AA. On note l'amorce du processus de lessivage dans le tiers droit de l'AR supérieur, dont la surface se trouve désormais émergée puisque $NER(t) < z_{\mathrm{surf}}$. De plus, on décèle des transferts significatifs de salinité de l'AA à l'AR sous-jacent dans les deux tiers gauches du modèle. Ceux-ci résultent vraisemblablement d'une combinaison intriquée de plusieurs processus de transport à l'interface AA–AR : diffusion / dispersion

vers le bas (là où $c_{\mathrm{AR}} < c_{\mathrm{AA}}$), léchage de la base de l'AA par les boucles convectives animant l'AR supérieur, etc. Aussi, on s'aperçoit que des eaux douces issues de profondeurs intermédiaires dans l'AR remontent çà et là sous l'action des boucles de convection. Ces remontées d'eaux douces sont toutefois limitées par l'AA, à cause de son effet de barrière hydraulique. Ces « doigts » d'eaux douces prennent des formes diverses et mouvantes, au gré de la dynamique convective. Ils s'avèrent néanmoins relativement éphémères, puisque leur très faible salinité entretient une forte migration diffusive / dispersive de la salinité vers eux depuis les zones environnantes plus salées.

5. Au milieu de la période investiguée (6.5 ka : « e »), soit 4500 ans après la fin de l'épisode marin, on constate que la salinité a diminué partout dans le système, y compris dans la portion inférieure de l'AA. En effet, les salinités dans le système sont toutes inférieures à ~25 g/L, hors saumures profondes. Le degré de réduction de masse est toutefois fort différent selon l'endroit.

    a. Dans la moitié droite du modèle, entièrement émergée depuis plus de 2000 ans, la circulation des eaux de recharge par convection forcée a déjà lessivé la quasi-totalité de la salinité qui avait été introduite dans l'AR pendant l'épisode marin. Fait intéressant, on observe une trace de salinité résiduelle à des profondeurs intermédiaires dans l'AR — clairement et plus en profondeur dans le modèle D2, plus subtilement et moins en profondeur dans le modèle D1. Cette salinité « rebut » délimite vraisemblablement la base de la zone active d'écoulement de l'eau souterraine dans l'AR.

    b. Dans la moitié gauche du modèle, la réduction de la salinité de l'AA se propage désormais à l'AR supérieur. Les salinités dans ce dernier, en effet, ne dépassent plus quelque 24 g/L, alors qu'elles pouvaient atteindre et même dépasser 30 g/L dans les vues précédentes (« d »). La salinité de l'AR est donc effectivement en cours de diminution, en partie à travers la migration diffusive vers l'AA puis la surface, mais aussi du fait de la dissémination progressive du stock de salinité de l'AR. On note par ailleurs une tranche horizontale semi-continue, environ 20 m sous l'interface AA–AR, le long de laquelle les salinités sont significativement inférieures par rapport aux salinités simulées en dessous et au-dessus. Ce creux de salinité révèle en fait que les doigts d'eaux salées occupant l'AR supérieur sont en train de se dissocier du réservoir de salinité ~immobile qu'est l'AA, à cause de l'entraînement densitaire.

c. Dans l’AA lui-même, la salinité poursuit son évolution principalement au gré de sa migration diffusive vers la surface — une évolution comparable à celles simulées précédemment dans les modèles 1D des étapes A et B.

6. Au temps final (13 ka : « f »), les modèles proposent chacun leur reconstitution des conditions actuelles dans le système. On y remarque à nouveau, d’une part, l’absence complète de salinité héritée de l’épisode marin dans la moitié droite du modèle, sans AA. D’autre part, dans la moitié gauche, on note, pour commencer, que l’action combinée de la migration diffusive vers la surface et de la migration convective-dispersive vers l’AR a considérablement réduit le stock de salinité de l’AA et limité celui-ci à la portion inférieure de l’AA. De plus, on constate que les processus combinés de lessivage convectif, d’entraînement densitaire et de diffusion / dispersion ont considérablement réduit la salinité de l’AR libre jusqu’à de grandes profondeurs. Enfin, on note la persistance de doigts d’eaux salées désormais plus nettement délimités, dont certains sont même déconnectés de l’AA qui, jusqu’alors, pouvait les alimenter en salinité (voir par exemple le tout petit doigt d’eaux salées isolé, cinquième à partir de la gauche, dans le modèle D1 : Figure 52f ; ou encore le doigt longeant la limite gauche du modèle D2 : Figure 54f).

En somme, ces vues instantanées de l’état du système aquifère régional permettent déjà de retracer de façon assez détaillée l’évolution paléo-hydrogéologique du système aquifère de la région d’étude tel que conceptualisé, et d’en apprendre beaucoup par rapport aux processus de transport de la salinité impliqués. En particulier, ces simulations numériques 2Dxz permettent de constater que la lente réduction des salinités dans l’AR supérieur captif sous l’AA n’est en fait pas due à un processus de lessivage mais plutôt aux effets combinés de la lente diffusion de la salinité à travers l’AA jusqu’en surface, de l’entraînement densitaire qui fait migrer progressivement une partie de la salinité de l’AR vers la profondeur, et du transport convectif-dispersif interne de la salinité (lent mais néanmoins significatif sur le long terme), qui homogénéisent peu à peu la répartition de la salinité au sein de l’AR supérieur. Enfin, les vues finales (13 ka : « f ») confirment que la présence d’eaux « saumâtres » (~10 g/L) dans l’AR au temps actuel est tout à fait compatible avec un scénario de paléosalinité marine dans lequel le fond marin aurait une salinité marine normale (35 g/L). À l’inverse, considérant les réductions importantes de salinité observées dans les simulations 2Dxz commentées ci-avant, on devine déjà que le scénario courant d’une Mer de Champlain de salinité trois fois inférieure à la salinité moyenne des océans (~12 g/L) est quant à lui très peu vraisemblable.

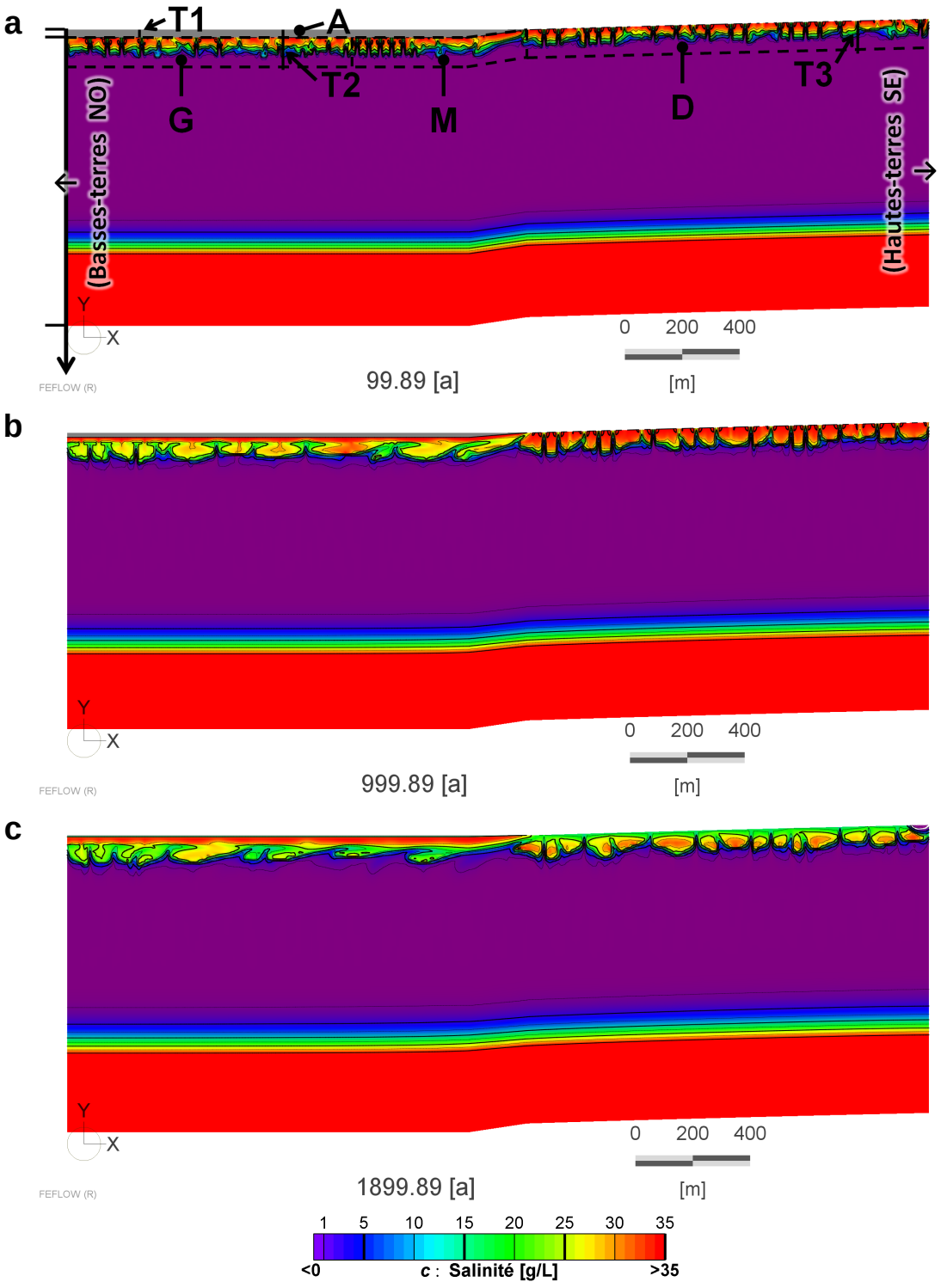


Figure 51 : Résultats du modèle D1 (décroissance normale de la K avec la profondeur dans l'AR) : Distribution spatiale de la salinité au sein du système aquifère régional pendant l'épisode marin, à : (a) *t* = 0.1 ka ; (b) *t* = 1.0 ka ; (c) *t* = 1.9 ka. Aucune exagération verticale (Y/X = 1:1). Les courbes blanches dessinées sur certaines des vues instantanées correspondent à des lignes de courant très actives de la zone alors émergée, là où le lessivage de la salinité de l'AR est le plus efficace. Les zones (A, G, M, D) et tracés verticaux (T1, T2, T3) sont utilisés plus loin dans la section.

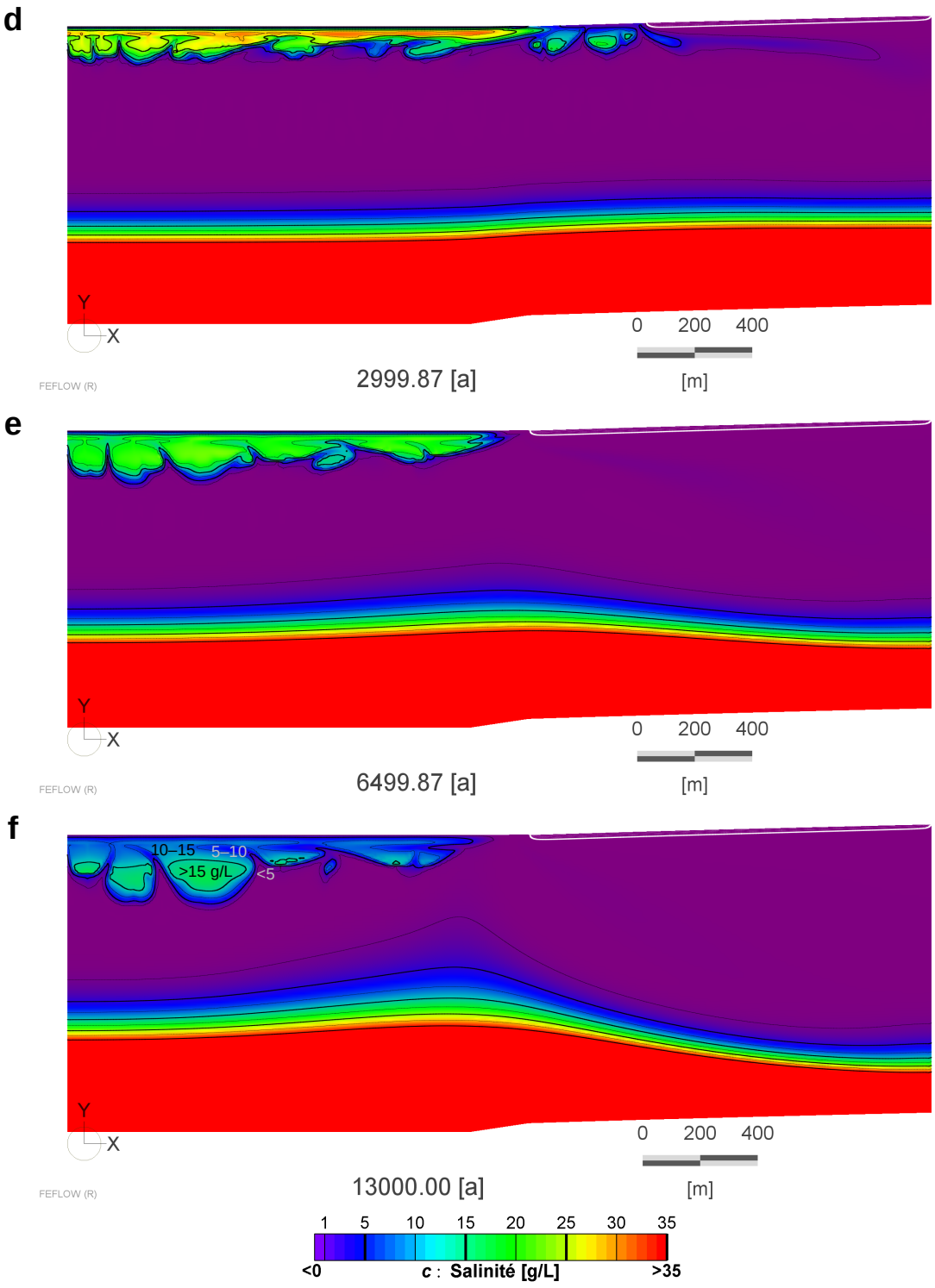


Figure 52 : Résultats du modèle D1 (décroissance normale de la K avec la profondeur dans l'AR) : Distribution spatiale de la salinité au sein du système aquifère régional après l'épisode marin, à : (d) *t* = 3.0 ka ; (e) *t* = 6.5 ka ; (f) *t* = 13.0 ka. Aucune exagération verticale (Y/X = 1:1). Les courbes blanches dessinées sur certaines des vues instantanées correspondent à des lignes de courant très actives de la zone alors émergée, là où le lessivage de la salinité de l'AR est le plus efficace.

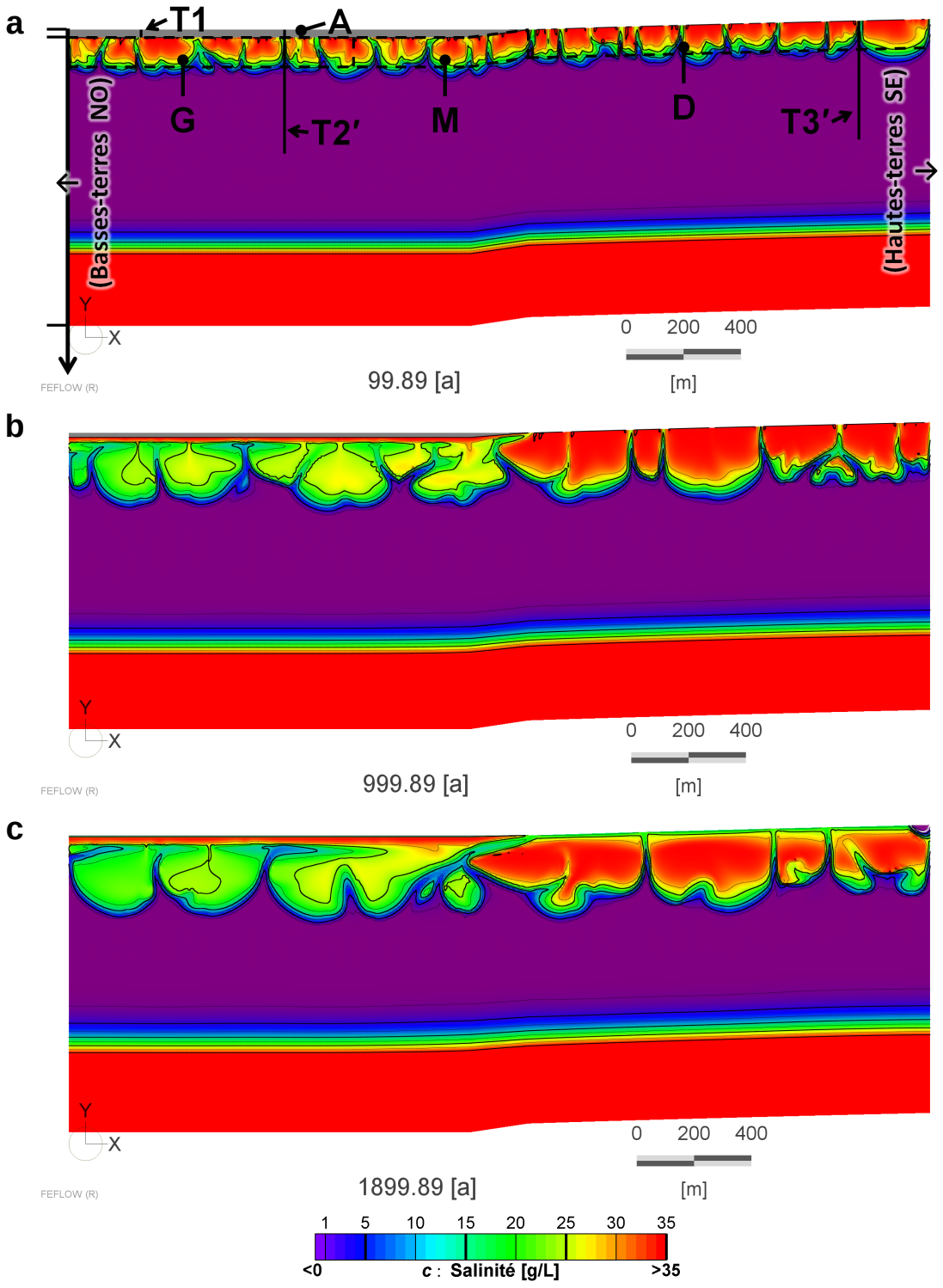


Figure 53 : Résultats du modèle D2 (décroissance ralentie de la K avec la profondeur dans l'AR) : Distribution spatiale de la salinité au sein du système aquifère régional pendant l'épisode marin, à : (a) *t* = 0.1 ka ; (b) *t* = 1.0 ka ; (c) *t* = 1.9 ka. Aucune exagération verticale (Y/X = 1:1). Les courbes blanches dessinées sur certaines des vues instantanées correspondent à des lignes de courant très actives de la zone alors émergée, là où le lessivage de la salinité de l'AR est le plus efficace. Les zones (A, G, M, D) et tracés verticaux (T1, T2′, T3′) sont utilisés plus loin dans la section.

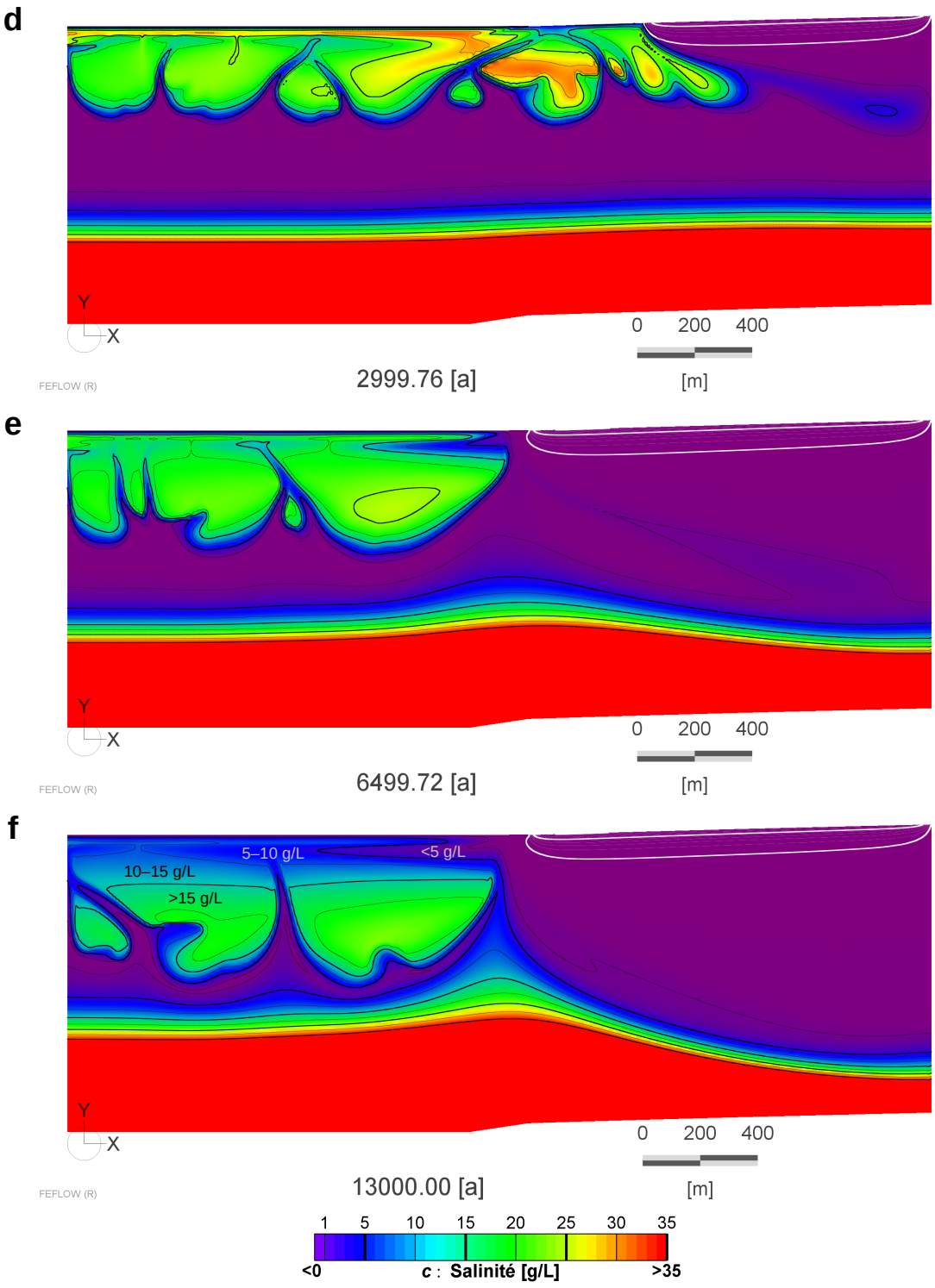


Figure 54 : Résultats du modèle D2 (décroissance ralentie de la K avec la profondeur dans l'AR) : Distribution spatiale de la salinité au sein du système aquifère régional après l'épisode marin, à : (d) *t* = 3.0 ka ; (e) *t* = 6.5 ka ; (f) *t* = 13.0 ka. Aucune exagération verticale (Y/X = 1:1). Les courbes blanches dessinées sur certaines des vues instantanées correspondent à des lignes de courant très actives de la zone alors émergée, là où le lessivage de la salinité de l'AR est le plus efficace.

Deuxièmement, les résultats des modèles D1 et D2 sont présentés sous forme d'images décrivant l'évolution temporelle de la salinité le long de trois tracés verticaux stratégiquement placés dans chacun des modèles (Figure 55 ; et Figures 51a et 53a pour situer ces tracés). Le premier tracé ("T1") est placé dans l'AA seulement, à la coordonnée horizontale x = 0.25 km, et traverse l'AA sur toute son épaisseur finale de 30 m. Les images correspondantes occupent la rangée du haut (Figure 55a). Le deuxième tracé ("T2") est placé à la coordonnée horizontale x = 0.75 km et traverse l'AR supérieur, puis l'AA sus-jacent en entier. Les images liées à ce deuxième tracé occupent la rangée du centre (Figure 55b). Le troisième tracé ("T3") est placé à la coordonnée horizontale x = 2.75 km et traverse l'AR supérieur seulement, puisqu'il n'y a aucune accumulation d'argiles à cet endroit. Les images liées à ce troisième tracé occupent la rangée du bas (Figure 55c). De l'interprétation de ces images se dégagent plusieurs constats intéressants.

Tout d'abord, l'évolution temporelle de la salinité dans l'AA, bien qu'à première vue similaire, affiche des différences entre les deux modèles (Figure 55a : tracé "T1"). En effet, la réduction de la salinité dans la moitié inférieure de l'AA du modèle D2 est en avance de ~1 ka par rapport au modèle D1, d'après les positions auxquelles les isolignes de salinité de 25, 20 et 15 g/L atteignent le toit du roc. De plus, la forme des isolignes de salinité aux temps t > 4 ka conforte l'hypothèse d'un contrôle dominant de la diffusion dans ce compartiment.

Ensuite, l'évolution temporelle de la salinité dans l'AR captif sous l'AA se révèle très différente selon le modèle (Figure 55b : tracé "T2"). Il y a d'abord la profondeur du front d'invasion de l'aquifère par les eaux salées qui change : dans le modèle D1, l'isoligne de 5 g/L atteint à peine une profondeur d'environ 80 m dans le roc, alors que dans le modèle D2, l'isoligne de 5 g/L atteint la profondeur de 300 m sous le toit du roc. Ceci confirme, une fois de plus, le contrôle très important de la K de l'AR sur la migration souterraine de la salinité. De plus, on constate, dans l'un et l'autre modèle, que le doigt d'eaux salées formé à cet endroit dès le tout début de l'épisode marin se déconnecte tôt dans la simulation (~0.7 ka dans le modèle D1 ; ~0.1 ka dans le modèle D2) du toit du roc et donc de l'AA. Cela n'empêche toutefois pas l'AA de réalimenter ultérieurement ledit doigt, par intermittence — dans le modèle D1 : de façon furtive vers 1.1 ka puis, plus subtilement encore, vers 4.7 ka (Figure 55.b1) ; dans le modèle D2 : de façon furtive vers 0.2 puis 0.6 ka, et ensuite de façon lente mais soutenue de ~2.5 ka jusqu'à ~8 ka (Figure 55.b2). On remarque, en outre, la présence passagère d'eaux douces à de faibles profondeurs dans l'AR captif du modèle D2 : très brève à ~0.1 ka, puis de ~1.5 à ~2.5 ka, ensuite ~4.8 à ~5.5 ka, et enfin de ~12 à ~13 ka (Figure 55.b2). Ce phénomène d'alternance entre des périodes de plongée de doigts d'eaux salées et denses d'une part et des périodes de « remontées » d'eaux douces d'autre

part met en lumière la diversité des conséquences possibles de l'entraînement densitaire associé à la circulation convective de l'eau souterraine, en termes de distribution spatiale et de migration temporelle de la salinité au sein d'un aquifère rocheux en conditions captives. De plus, on constate qu'après la deuxième période de remontée d'eaux douces, soit à partir de ~2.5 ka, la plongée d'eaux salées sous l'effet de l'entraînement densitaire reprend de plus belle en s'approvisionnant en salinité dans l'AA sus-jacent.

Enfin, les images de la rangée inférieure (Figure 55c : tracé "T3") révèlent la dynamique d'invasion très distincte propre aux portions « libres » de l'AR — c.-à-d. exemptes d'AA sus-jacent. Dès le premier coup d'œil, on constate que l'invasion de l'AR libre s'étend sur tout l'épisode marin, pour cesser sitôt après. Les profondeurs atteintes par le front d'invasion de l'AR libre par les eaux salées sont néanmoins à peu près égales à celles observées dans l'AR captif (Figure 55c,b). La diminution très rapide de la salinité au sein de l'AR supérieur libre vers 2 ka montre à quel point la réduction de masse puis le lessivage de l'aquifère rocheux peuvent être efficaces, dès l'amorce du déclin de la salinité des eaux marines, puis ensuite avec le retrait des eaux inondantes et le passage à des conditions émergées et à une recharge continuelle en eaux douces, là où il n'y a pas d'aquitard « protecteur ».

En somme, ces résultats mettent en évidence que l'invasion de l'aquifère rocheux par les eaux marines de la Mer de Champlain ne s'est pas limitée à l'épisode marin ; au contraire, elle opère encore aujourd'hui, principalement là où l'aquifère rocheux est captif sous un épais aquitard argileux, mais aussi en profondeur dans ses portions libres, où des doigts « résiduels » d'eaux saumâtres poursuivent leur lente plongée en toute discrétion, malgré le lessivage très actif à des profondeurs moindres.

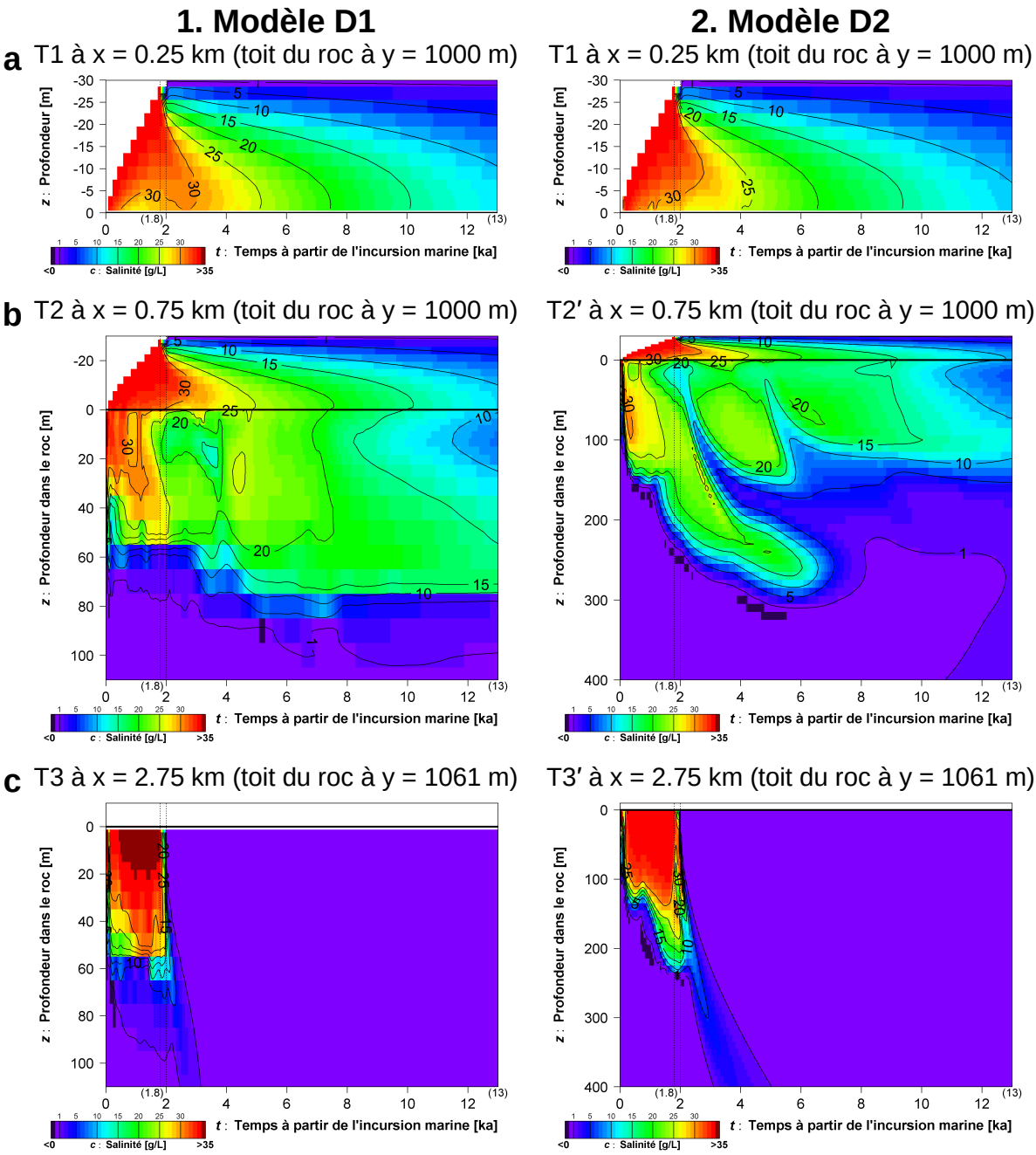


Figure 55 : Évolutions spatiotemporelles de la salinité : (a) le long du tracé “T1”, soit à l’intérieur de l’aquitard argileux ; (b) le long du tracé “T2”, soit dans l’aquifère rocheux supérieur captif sous une épaisse couche d’argiles ; et (c) le long du tracé “T3”, soit dans l’aquifère rocheux supérieur libre d’argiles ; d’après les modèles numériques D1 et D2. Noter l’échelle verticale différente entre certains des graphiques et la notation prime utilisée par conséquent pour les tracés T2′ et T3′. Les coordonnées verticales étant des profondeurs relatives au toit du roc, elles sont négatives à l’intérieur de l’AA ; il suffit alors d’ignorer le signe moins pour connaître l’élévation dans l’AA. Un trait horizontal noir indique le toit du roc (et donc l’interface aquifère-aquitard, dans la rangée ‘b’). Épisode marin de t = 0.0 à t = 2.0 ka, avec un déclin tardif de la salinité marine à partir du temps seuil t_{swchg} = 1.8 ka. Voir les Figures 51a et 53a pour situer ces tracés dans les vues en coupe 2D, respectivement pour les modèles D1 et D2.

Troisièmement, on compare les salinités actuelles ($t = 13$ ka) simulées aux salinités observées dans le système aquifère régional à l'intérieur de la zone d'eaux souterraines saumâtres (Figure 56). Pour ce faire, ont été préparés des profils verticaux de statistiques sur la salinité actuelle de l'aquitard argileux (AA) et de l'aquifère rocheux (AR) supérieur en fonction de la profondeur dans le roc ; d'une part pour les données simulées et, d'autre part, à partir des salinités observées, au site de Varennes pour l'AA (Desaulniers & Cherry, 1989), et dans la partie nord-ouest de la région d'étude (zone saumâtre) pour l'AR supérieur (Beaudry *et al.*, 2018). Quatre modèles 2Dxz ont été considérés pour les fins de cette analyse. Aux deux modèles courants D1 et D2 (pour lesquels c_{swref} = 35 g/L), ont été ajoutées deux variantes du modèle D1 qui ne se différencient que par le paramètre de salinité maximale des eaux marines utilisé : c_{swref} = 24 g/L dans le modèle D1′ (valeur récupérée des étapes de modélisation précédentes) ; c_{swref} = 12 g/L dans le modèle D1″ (valeur représentant un mélange de 1/3 d'eau de mer de salinité normale et de 2/3 d'eau douce).

Cette analyse indique que seuls les modèles D1 et D2 offrent de bonnes performances prédictives, au moins en ce qui a trait à l'évolution de la salinité dans l'aquitard argileux jusqu'au temps actuel (Figure 56a,b). Les modèles D1′ et D1″, en revanche, terminent leur simulation numérique avec des salinités nettement insuffisantes dans l'AA (Figure 56c,d). En particulier, on remarque que les salinités finales simulées par le modèle D1″ sont environ trois fois plus faibles que les salinités observées et, de là, on déduit que la valeur de c_{swref} utilisée dans le modèle D1″ ($c_{\mathrm{swref}} \approx 1/3\ c_{\mathrm{ocean}}$) est environ 3 fois trop faible (Figure 56d). Ainsi, cette analyse révèle qu'il est en fait très improbable que la salinité de la Mer de Champlain n'ait été que de 1/3 de la salinité océanique, et assez peu probable qu'elle ait été nettement inférieure à la salinité océanique. De plus, elle conforte notre hypothèse d'une diminution très tardive de la salinité des eaux du fond marin. En outre, la similarité des performances prédictives des modèles D1 et D2 met en évidence le fait qu'il n'est pas possible de déterminer avec confiance lequel des profils de K(z) testés est le plus proche de la réalité avec des objectifs de calage (salinités observées) concentrés essentiellement dans l'AA.

En somme, cette analyse démontre que ni c_{swref} = 12 g/L ni même c_{swref} = 24 g/L ne sont des scénarios de paléosalinité marine plausibles dès lors que l'on considère la dynamique convective intrinsèquement multidimensionnelle impliquée dans le processus d'invasion marine du système aquifère régional. Par conséquent, le scénario de paléosalinité marine « le plus vraisemblable » pour la Mer de Champlain apparaît être le suivant : une salinité maximale de ~35 g/L persistant de 0 à 1.8 ka, pour finalement diminuer jusqu'à ~0.25 g/L entre 1.8 et 2.0 ka.

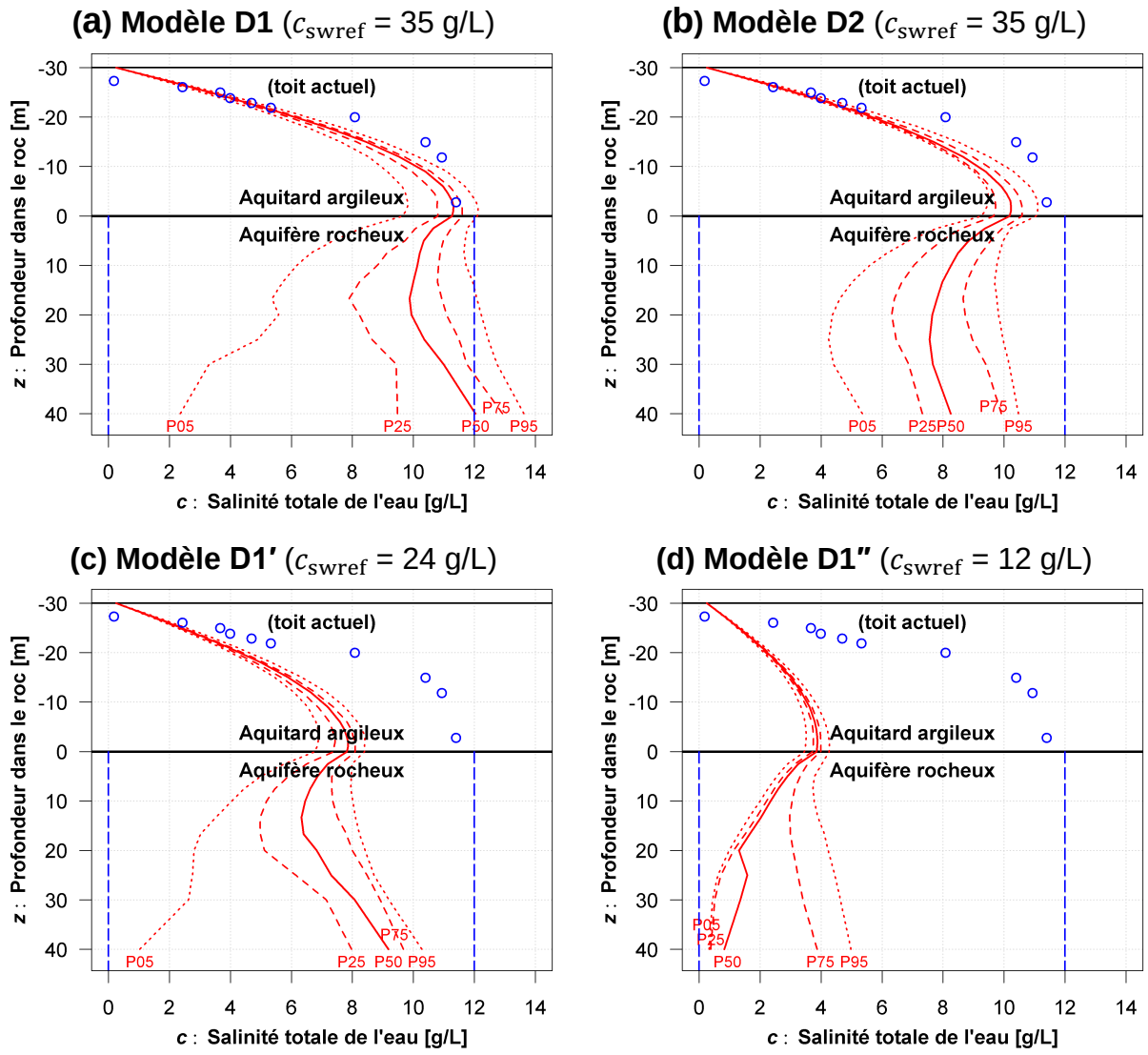


Figure 56 : Comparaison des salinités simulées pour le temps actuel (*t* = 13 ka) aux salinités observées au site de Varennes pour l'aquitard argileux (Desaulniers & Cherry, 1989) et dans la partie nord-ouest de la région d'étude pour l'aquifère rocheux supérieur (Beaudry *et al.*, 2018). Les salinités sont rapportées en fonction de la profondeur dans l'aquifère rocheux (*z*). (a) Résultats du modèle D1 : salinité marine maximale de 35 g/L et décroissance normale de K(z) ; (b) Résultats du modèle D2 : salinité marine maximale de 35 g/L mais décroissance ralentie de K(z) ; (c) Résultats du modèle D1′ : salinité marine maximale de 24 g/L et décroissance normale de K(z) ; (d) Résultats du modèle D1″ : salinité marine maximale de 12 g/L et décroissance normale de K(z). Les courbes rouges indiquent différents percentiles (dont la médiane : "P50") calculés en fonction de *z* à partir des salinités actuelles simulées dans le premier tiers gauche du modèle numérique (x ≤ 1.0 km), tant dans l'aquitard argileux (pleinement formé) que dans l'aquifère rocheux supérieur (z ≤ 40 m). Les lignes bleues pointillées indiquent les salinités minimale et maximale observées dans l'aquifère rocheux supérieur (indépendamment de la profondeur dans celui-ci).

Quatrièmement, enfin, les résultats des modèles D1 et D2 sont résumés par le biais de courbes décrivant l'évolution temporelle de la salinité moyenne au sein de l'aquitard argileux (AA) d'une part, et dans l'aquifère rocheux (AR) d'autre part (Figure 57). Plus précisément, trois « zones de suivi » sont considérées pour faire le suivi de la salinité dans les 100 mètres supérieurs de l'AR : une zone « gauche » ("G") de x = 0 à 1.0 km, une zone du « milieu » ("M") de x = 1.0 à 1.6 km, et une zone « droite » ("D") de x = 1.6 à 3.0 km. La délimitation des trois zones de l'AR ("G", "M" et "D") ainsi que de l'AA ("A") est illustrée dans les Figures 51a et 53a. Les horizons plus profonds de l'AR (au-delà de 100 m de profondeur) ne sont pas considérés dans cette présentation graphique des résultats, excluant de ce fait les saumures profondes. L'expression du stock de salinité sous la forme d'une salinité moyenne permet une comparaison plus aisée et révélatrice des évolutions des différentes zones malgré leurs volumes poreux contrastés.

On remarque tout d'abord que l'évolution du stock de salinité est pratiquement identique dans l'AA des deux modèles (Figure 57). Pendant toute la partie non tardive de l'épisode marin durant laquelle la salinité des eaux marines est maximale (35 g/L), la salinité moyenne ($\bar{c}$) dans l'AA demeure très élevée, entre 32 et 35 g/L. C'est la période où les eaux salées du fond marin se mettent en place au sein même des sédiments venant s'accumuler pour former l'AA. La lente décroissance de la $\bar{c}$ dans l'AA, ainsi que l'écart de quelques g/L qu'elle entretient entre la $\bar{c}$ dans l'AA et dans la mer, résultent du fait que l'AA transfère progressivement une fraction de son stock de salinité à l'AR sous-jacent. Les sauts récurrents de la $\bar{c}$ de l'AA, quant à eux, exposent l'imperfection de l'algorithme d'interpolation utilisé (dans notre *plugin* PaleoSea2D) afin d'attribuer des salinités aux nouveaux nœuds chaque fois que de nouvelles couches d'éléments numériques sont activées pour simuler l'épaississement progressif de l'AA. Puis, dès l'amorce de la diminution de la salinité marine (t = 1.8 ka), l'AA connaît une chute rapide, mais limitée, de sa $\bar{c}$. Cette chute s'explique en partie par le fait que les eaux marines piégées dans les sédiments nouvellement accumulés sont de moins en moins salées, mais aussi par les forts gradients verticaux de c entretenus au toit de l'AA par la diminution rapide de la salinité marine $C_{\mathrm{sw}}(t)$, gradients qui entraînent une forte migration diffusive ascendante de la salinité de l'AA supérieur vers la surface. À la fin de l'épisode marin (t = 2 ka), le taux de décroissance change brusquement, confirmant que c'est bel et bien la diminution continue et rapide de la salinité marine au cours des derniers 0.2 ka de l'épisode marin qui a accéléré la réduction du stock de salinité dans l'AA alors. Par la suite (t > 2 ka), la réduction du stock de salinité de l'AA est très lente et régulière.

Du côté de l'AR, on constate d'abord que la $\bar{c}$ évolue de façon très semblable seulement au tout début de l'épisode marin ($t < t_{\mathrm{sed.beg}} = 0.05$ ka), court intervalle de temps durant lequel la

couverture argileuse est partout absente dans les modèles — la sédimentation n'est alors pas encore démarrée (Figure 57). Dès l'apparition des premiers mètres d'argiles, la $\bar{c}$ de la seule zone exempte d'argiles ("D") commence à se démarquer en poursuivant son augmentation, tandis que les $\bar{c}$ des zones couvertes d'argiles ("G" et "M") plafonnent rapidement (dans le modèle D1, vers ~1 ka) voire amorcent une diminution notable (dans le modèle D2, dès ~0.2 ka) (Figure 57a,b). Phénomène particulièrement intéressant, la $\bar{c}$ de la zone "G" se remet à augmenter lentement, de ~2 jusqu'à ~5 ka (Figure 57a,b), nécessairement grâce à l'effet réservoir de l'AA puisque lui seul est en mesure de transférer une telle quantité de salinité à l'AR une fois la mer retirée. Aux temps plus avancés (t > 5 ka), les deux zones de l'AR captives sous l'AA ("G" et "M") connaissent une décroissance similaire de leur $\bar{c}$, laquelle suit d'assez près la diminution de la $\bar{c}$ dans l'AA (Figure 57). Cela conforte, une fois de plus, l'hypothèse d'un rôle important de la diffusion sur l'évolution de la salinité souterraine non seulement dans l'AA mais aussi dans l'AR. Par ailleurs, dans la zone exemple d'argiles ("D"), la $\bar{c}$ augmente très rapidement au tout début de l'épisode marin, puis à un rythme décroissant ensuite, jusqu'à atteindre une valeur maximale à t = 1.8 ka, pour ensuite décliner prestement jusqu'à la fin de l'épisode marin, puis plus lentement par après. La $\bar{c}$ maximale de la zone "D" s'avère limitée à ~20 g/L dans le modèle D1, à cause de la décroissance rapide de K(z) dans l'AR, tandis qu'elle atteint pratiquement la salinité marine non tardive $C_{\mathrm{sw}}(t \leq 1.8\ \mathrm{ka})$ = 35 g/L dans le modèle D2, en raison de la décroissance plus lente de K(z) dans l'AR. Dès t ~ 4 ka, la zone "D" est déjà complètement débarrassée des eaux salées qui s'y étaient précédemment introduites en provenance de la Mer de Champlain. Enfin, force est de constater que les évolutions de stock de salinité ($\bar{c}$) des différentes zones simulées par les modèles D1 et D2 sont très similaires au-delà de t ~ 8 ka et ce, jusqu'au temps actuel. Autrement dit, le contrôle de K(z) sur l'évolution tardive du stock de salinité dans les différentes zones de l'AR supérieur apparaît limité.

En somme, les résultats de la Figure 57 soulignent que la présence d'un aquitard d'épaisseur non négligeable est une condition essentielle à la préservation d'une salinité élevée à long terme dans l'aquifère rocheux, confirment le rôle de réservoir de salinité joué par l'aquitard, font ressortir l'importance du processus de diffusion sur l'évolution de la salinité du système aquifère, et précisent les limites du contrôle exercé par la K(z) de l'AR sur le processus d'invasion marine.

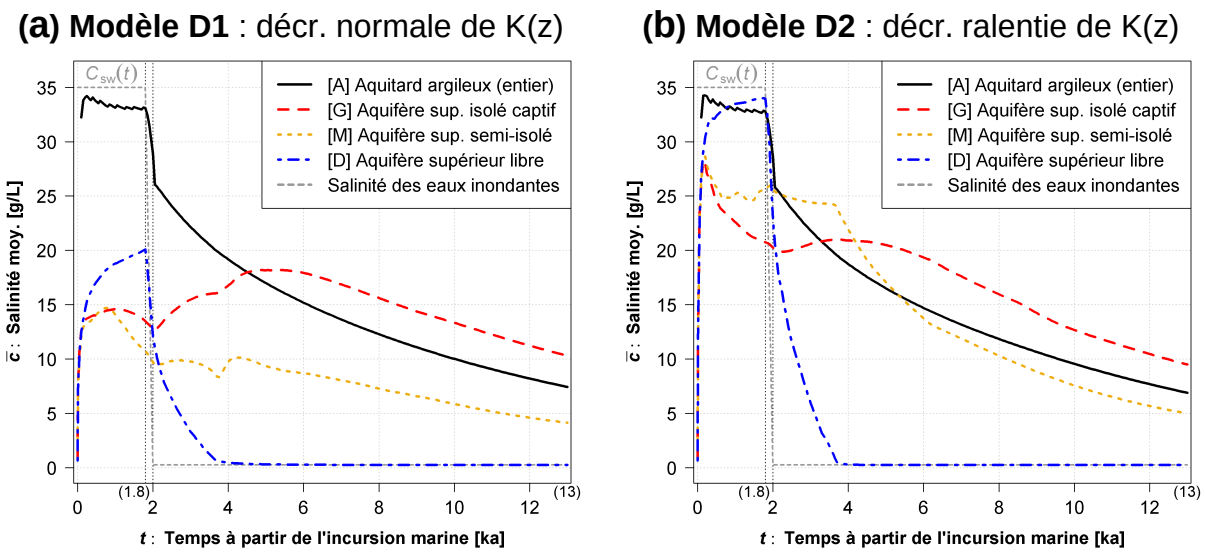


Figure 57 : Évolution temporelle de la salinité moyenne au sein de l'aquitard argileux d'une part, et de trois zones situées dans la partie supérieure de l'aquifère rocheux (AR) d'autre part. (a) Résultats du modèle D1 : décroissance normale de K avec la profondeur dans l'AR ; (b) Résultats du modèle D2 : décroissance ralentie de K avec la profondeur dans l'AR. La courbe grise pointillée indique la variation de la salinité des eaux inondantes au cours de l'épisode marin. La délimitation des trois zones de l'AR ainsi que de l'aquitard argileux est illustrée dans les Figures 51a et 53a.

6. Discussion et conclusion

À la fin de la dernière glaciation il y a environ 13 000 ans, un bras océanique nommé Mer de Champlain a fait une incursion dans le sud du Québec pendant 2 000 ans. Cette incursion a mené à l'invasion d'eau marine dans les aquifères sous-jacents. Les effets de cette incursion marine sont particulièrement notables en Montérégie Est, où le système aquifère rocheux fracturé régional contient actuellement des eaux saumâtres sur plus de 2 000 km^2. Des travaux antérieurs ont certes étudié le processus d'invasion marine, surtout par modélisation numérique, mais très peu d'études avaient tenté de reconstituer les paléoconditions sous lesquelles s'est faite l'invasion marine postglaciaire des aquifères. L'objectif des travaux documentés dans le présent article était ainsi de mieux comprendre les processus impliqués dans l'introduction d'eau marine dans les aquifères sous les paléoconditions ayant prévalu dans le sud du Québec.

Sur la base d'une conceptualisation bien étayée du problème paléo-hydrogéologique à l'étude, nous avons développé une suite de modèles progressivement plus complexes, avec des modèles numériques bâtis et puis calés avec un éventail de données paléo-hydrogéologiques et contemporaines de la région d'étude, dont notamment un profil vertical de salinités observées

dans l'épaisse couche d'argiles déposées dans la région par la Mer de Champlain. Le modèle conceptuel global élaboré prend en compte l'évolution temporelle des paléoconditions marines (niveau d'eau et salinité), la mise en place d'un aquitard argileux sur le fond marin et la diminution de la conductivité hydraulique de l'aquifère rocheux avec la profondeur. Le transfert de salinité dans l'aquitard argileux a d'abord été étudié à l'aide de modèles analytiques ou numériques très simples en une dimension (colonnes 1D verticales) : diffusion seule dans l'aquitard (modèles A1 et A2) ; diffusion / dispersion et advection à travers l'aquitard (modèle B1) ; effet de la sédimentation-consolidation sur l'expulsion d'eau marine de l'aquitard (modèles C1 et C2). Ensuite, les conditions et processus ont été simulés de façon combinée sur une coupe 2D verticale représentant schématiquement la région d'étude (modèles D1 et D2, ainsi que leurs variantes D1′ et D1″), à l'aide du logiciel et simulateur numérique FEFLOW.

Les résultats des modélisations numériques, tant 1D que 2D, démontrent l'impact majeur de la sédimentation d'un aquitard argileux sur le fond marin, non seulement pendant mais aussi après la formation de l'aquitard. De par sa faible conductivité hydraulique, l'aquitard en formation a tôt fait de freiner l'invasion marine directe de l'aquifère rocheux sous-jacent. La période d'invasion marine ouverte à la mer et dominée par l'entraînement densitaire (vers le bas) des eaux marines est ainsi très courte (de l'ordre de 250 ans). Une partie de la salinité emmagasinée dans le grand volume d'eau piégée dans l'aquitard continue toutefois à être émise dans l'aquifère et ce, même après que l'aquitard soit entièrement formé, ce qui prolonge d'autant l'invasion d'eau marine dans l'aquifère. En particulier, la consolidation très active de l'aquitard argileux pendant sa formation apparaît capable de transférer des volumes considérables d'eaux salées vers l'aquifère au cours de l'épisode marin. Ensuite, les modèles 2D permettent de découvrir que de l'eau douce migre çà et là vers le haut par effet de densité lors de l'invasion marine, puis s'accumule quelque temps dans un intervalle sous l'aquitard. Ces remontées d'eaux douces témoignent de la diversité des conséquences possibles de l'entraînement densitaire associé à la circulation convective de l'eau souterraine en présence de salinités importantes. L'aquitard joue très bien son rôle « d'obstacle isolateur » en empêchant la recharge directe de l'aquifère et le lessivage de l'eau marine, menant ainsi à la conservation d'importants volumes d'eau souterraine saumâtre dans le système aquifère régional, à la fois dans l'aquitard argileux et dans l'aquifère rocheux sous-jacent. La pénétration de l'eau marine dans l'aquifère rocheux apparaît fortement contrôlée (et limitée) par la réduction de la conductivité hydraulique avec la profondeur dans celui-ci. Aussi a-t-on mis en évidence que c'est principalement la diffusion qui, profitant d'une longue période de plus de 11 000 ans suivant la période de salinité maximale des eaux inondantes marines, restreint l'évolution post-marine des salinités dans le système aquifère régional. En effet, la diffusion rabaisse graduellement la salinité

maximale pouvant être rencontrée dans la partie supérieure du système aquifère, en évacuant peu à peu son stock de salinité vers la surface. La salinité maximale hors saumures profondes passe ainsi progressivement de celle des eaux marines initialement introduites (~35 g/L) jusqu'à celle d'eaux saumâtres (~12 g/L) telles qu'observées aujourd'hui dans la région d'étude. De plus, nos travaux mettent en évidence le rôle de « réservoir de salinité » joué par l'aquitard. Dès son existence mais plus clairement encore une fois la mer retirée, l'aquitard continue de transférer des quantités notables de salinité à l'aquifère rocheux, par une combinaison intriquée de plusieurs processus de transport à l'interface aquitard–aquifère incluant notamment la diffusion / dispersion ainsi qu'un « léchage » de la base de l'aquitard par les boucles convectives animant l'aquifère supérieur. La diffusion est donc un mécanisme majeur intervenant à pratiquement tous les niveaux dans le problème. La convection-dispersion joue néanmoins le rôle dominant dans la migration de la salinité au sein de l'aquifère rocheux, et ce, même dans ses zones captives (sous l'aquitard). Elle contrôle ainsi la répartition et la lente homogénéisation (encore largement inachevée à ce jour) de la salinité souterraine dans l'aquifère rocheux. Dans les zones plus élevées du système aquifère où il n'y a aucune accumulation d'argiles, le lessivage des eaux salées par la circulation d'eaux douces devient le processus dominant dès le retrait des eaux inondantes (et le passage à des conditions de recharge continuelle en eaux douces). Il y est très efficace, menant à l'évacuation de la quasi-totalité de la salinité précédemment introduite dans l'aquifère rocheux. À l'opposé, le lessivage de l'aquifère rocheux s'avère quasi nul dans les zones basses, où l'aquifère demeure isolé hydrauliquement de la surface par un épais aquitard argileux, expliquant la présence actuelle d'eaux souterraines saumâtres dans les grandes zones captives de l'aquifère régional. En outre, nos travaux suggèrent un délai d'environ 25 ka avant que la salinité souterraine ne décroisse jusqu'à un niveau « utilisable pour les activités humaines » (< 4 g/L) dans les zones captives.

Lors du calage des modèles numériques, la salinité de fond de la Mer de Champlain requise pour prédire les salinités maximales actuellement observées dans la zone saumâtre (~12 g/L) s'est avérée être ~35 g/L, soit la salinité normale des mers (tel que considéré dans les modèles D1 et D2). Nos travaux montrent ainsi qu'il est non seulement plausible mais fort probable que les eaux profondes de la Mer de Champlain aient eu une salinité marine normale, ce qui est en accord avec certains auteurs (Rodrigues, 1992; Guilbault, 1993), mais en contradiction avec des travaux antérieurs ayant allégué que l'eau de la Mer de Champlain constituait un mélange d'eaux marines, glaciaires et pluviales bien homogénéisé et donc de salinité réduite (Hillaire-Marcel, 1988; Desaulniers & Cherry, 1989; Cloutier *et al.*, 2010). Nos résultats montrent que les salinités maximales observées aujourd'hui dans l'aquitard argileux et l'aquifère rocheux supérieur (~12 g/L)

ne seraient pas directement représentatives de la salinité originelle d'une eau marine diluée au départ, mais plutôt le résultat d'une longue évolution interne des salinités au sein du système aquifère influencée par les paléoconditions environnementales régionales. En fait, ni 12 g/L ni même 24 g/L n'apparaissent des salinités marines plausibles dès lors que l'on considère la dynamique convective impliquée dans le processus d'invasion marine du système aquifère régional. D'après nos simulations, le scénario de paléosalinité marine « le plus vraisemblable » pour la Mer de Champlain apparaît finalement être le suivant : une salinité maximale de ~35 g/L persistant de 0 à 1.8 ka, pour finalement diminuer jusqu'à la salinité minimale des eaux douces entre 1.8 et 2.0 ka.

Malgré une connaissance encore limitée des paléoconditions et des propriétés hydrauliques du système aquifère régional, ces travaux donnent une explication plausible et quantitative de la salinité passée à actuelle de l'eau souterraine dans l'aquitard argileux et l'aquifère rocheux de la Montérégie Est. Les travaux fournissent surtout une bien meilleure compréhension des processus d'invasion marine des aquifères rocheux sous des paléoconditions réalistes qui pourraient être applicables à d'autres régions ayant subi des invasions marines postglaciaires. En étudiant les mécanismes en jeu individuellement puis en combinaison, les modèles 1D développés ont servi à investiguer la majorité des processus hydrogéologiques du modèle conceptuel, bien que de façon simplifiée ; processus qui ont finalement été mis en interaction dans les modèles numériques 2D. Ce faisant, les modèles 2D ont non seulement permis de reproduire les constats surtout qualitatifs accumulés jusqu'à présent dans la littérature, mais aussi de quantifier l'importance des processus en jeu. De plus, à notre connaissance, c'est effectivement la première fois que le processus de sédimentation-consolidation est considéré puis simulé numériquement dans le cadre d'une étude paléo-hydrogéologique s'intéressant à l'évolution d'un système aquifère régional ayant connu un épisode prolongé d'invasion marine postglaciaire.

Néanmoins, nous reconnaissons que bien des aspects liés à la modélisation du problème à l'étude restent encore à approfondir. Notamment, il serait particulièrement intéressant d'étudier les incidences de la « double porosité » du milieu (Warren & Root, 1963; Coats & Smith, 1964; Moench, 1984; Pruess, 1992; Zuber & Motyka, 1994; de Dreuzy *et al.*, 2013; Wang *et al.*, 2013; Blessent *et al.*, 2014; Babey *et al.*, 2015; Babey *et al.*, 2017) sur le transport de la salinité de même que sur le « transport d'âge » (Goode, 1996; Goode, 1999; Bethke & Johnson, 2001; Cornaton & Perrochet, 2006; Kazemi *et al.*, 2006; Bethke & Johnson, 2008; Sanford, 2010; Cornaton, 2012; Gomez & Wilson, 2013; Suckow, 2014), puisque de tels concepts ont rarement été appliqués, et encore moins appliqués conjointement avec les effets de la densité variable. De

même, il serait pertinent d'évaluer quantitativement les flux de masse simulés dans les modèles numériques 2D, entre autres afin de pouvoir les comparer avec ceux estimés à partir des modèles 1D. Aussi, une représentation encore plus réaliste des paléoconditions environnementales de surface ainsi que de certaines conditions dans le système aquifère permettrait probablement de mieux quantifier plus précisément leur influence sur le processus d'invasion. Enfin, des simulations paramétriques explorant une gamme plus large de conditions permettraient d'évaluer la sensibilité du processus d'invasion par rapport à celles-ci.

En outre, bien que les travaux aient été basés sur les conditions spécifiques de la Montérégie Est, nous estimons que les processus représentés, incluant notamment l'entraînement densitaire et la sédimentation de l'aquitard argileux, devraient être généralement applicables à d'autres régions ayant subi des invasions marines postglaciaires. Ces travaux pourraient ainsi supporter l'étude du phénomène d'invasion marine dans nombre d'autres endroits du monde où il a laissé une forte empreinte sur la géochimie des eaux souterraines. La compréhension des processus contrôlant la présence d'eau marine dans les aquifères est en fait un problème scientifique d'un grand intérêt, et un moyen important dans une perspective de protection de la qualité de l'eau souterraine. L'étude du phénomène d'invasion marine donne aussi l'occasion d'évaluer les impacts à très long terme de changements majeurs des conditions paléo-hydrogéologiques régionales, d'explorer les effets de telles perturbations sur les systèmes aquifères régionaux et, par là même, d'estimer le temps de réponse des systèmes face à des perturbations associées à l'évolution présente et future du climat terrestre. Nous espérons ainsi que nos travaux, en plus d'éclairer sur l'évolution passée des systèmes aquifères ayant fait l'objet d'une invasion marine, vont aussi mettre en perspective les perturbations possibles des ressources en eau souterraine résultant des changements climatiques à venir, particulièrement en région côtière où la hausse du niveau marin prévue au cours des prochaines décennies risque de changer les conditions environnementales de façon notable (Nicholls & Cazenave, 2010).

7. Remerciements

L’auteur principal tient à remercier ses collègues, en particulier Gabriel Fabien-Ouellet, pour leurs conseils techniques, et bien sûr ses coauteurs pour leur passion contagieuse pour le sujet investigué, leurs bonnes idées, et pour le temps qu’ils ont consacré à ce sujet. Merci également aux membres du comité d’évaluation de la thèse, Daniel Paradis, Kent Novakowski et Olivier Bour, pour leurs commentaires constructifs. Cette recherche a été financée en partie par une bourse doctorale accordée à l’auteur principal par le CRSNG.

Le lecteur intéressé est invité à télécharger les programmes informatiques développés en langage R ou en C++ pour mener à bien ces travaux (Annexe A8.3), ainsi que les données liées à l’étude de cas abordée dans ce chapitre (Annexe A8.4).

RÉFÉRENCES

Abesser C & Lewis M (2015) A semi-quantitative technique for mapping potential aquifer productivity on the national scale: example of England and Wales (UK). *Hydrogeology Journal* 23(8):1677-1694.

Acworth RI (1987) The development of crystalline basement aquifers in a tropical environment. *Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology* 20(4):265-272.

Al Farrah N, Van Camp M & Walraevens K (2013) Deducing transmissivity from specific capacity in the heterogeneous upper aquifer system of Jifarah Plain, NW-Libya. *Journal of African Earth Sciences* 85:12-21.

Allen DJ, Brewerton LJ, Coleby LM, Gibbs BR, Lewis MA, MacDonald AM, Wagstaff SJ & Williams AT (1997). *The physical properties of major aquifers in England and Wales* (BGS Technical Report WD/97/34), *In* Environment Agency R&D Publication 8, British Geological Survey, 312 p.

Appelo CAJ & Postma D (2004) *Geochemistry, groundwater and pollution.* CRC press.

Arihood LD (1994) Hydrogeology and paths of flow in the carbonate bedrock aquifer, northwestern Indiana. *JAWRA Journal of the American Water Resources Association* 30(2):205-218.

ASTM D5472-93(2005), *Standard test method for determining specific capacity and estimating transmissivity at the control well (Withdrawn 2014)*, ASTM International, West Conshohocken, PA, 2005, www.astm.org.

Babey T, de Dreuzy J-R & Casenave C (2015) Multi-Rate Mass Transfer (MRMT) models for general diffusive porosity structures. *Advances in Water Resources* 76(0):146-156.

Babey T, de Dreuzy J-R, Rapaport A & Rojas-Palma A (2017) Inherent relevance of MRMT models to concentration variance and mixing-induced reactivity. *Advances in Water Resources* 110(Supplement C):291-298.

Ballantyne CK (2002) A general model of paraglacial landscape response. *The Holocene* 12(3):371-376.

Banks D, Morland G & Frengstad B (2005) Use of non-parametric statistics as a tool for the hydraulic and hydrogeochemical characterization of hard rock aquifers. *Scottish Journal of Geology* 41(1):69-79.

Bayer U & Wetzel A (1989) Compactional behavior of fine-grained sediments — examples from Deep Sea Drilling Project cores. *Geologische Rundschau* 78(3):807-819.

Bear J & Cheng AHD (2010) *Modeling groundwater flow and contaminant transport.* Springer Science & Business Media. 834 p.

Beaudry C, Malet X, Lefebvre R & Rivard C (2011). *Délimitation des eaux souterraines saumâtres en Montérégie Est, Québec, Canada* (Open File 6960), Geological Survey of Canada, 26 p.

Beaudry C, Lefebvre R, Rivard C & Cloutier V (2018) Conceptual model of regional groundwater flow based on hydrogeochemistry (Montérégie Est, Québec, Canada). *Canadian Water Resources Journal*, 21 p., doi: 10.1080/07011784.2018.1461579.

Benabdallah EM (2010) *Mouvement des eaux souterraines et des ions majeurs dans une argile Champlain depuis sa formation*. PhD thesis (École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada). 357 p.

Berkowitz B (2002) Characterizing flow and transport in fractured geological media: A review. *Advances in Water Resources* 25(8-12):861-884.

Bethke CM & Johnson TM (2001) Paradox of groundwater age: Correction. *Geology* 30(4):385-388.

Bethke CM & Johnson TM (2008) Groundwater Age and Groundwater Age Dating. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences* 36(1):121-152.

Blanchette D, Lefebvre R, Nastev M & Cloutier V (2010) Groundwater Quality, Geochemical Processes and Groundwater Evolution in the Chateauguay River Watershed, Quebec, Canada. *Canadian Water Resources Journal* 35(4):503-526.

Blessent D, Jørgensen PR & Therrien R (2014) Comparing discrete fracture and continuum models to predict contaminant transport in fractured porous media. *Groundwater* 52(1):84-95.

Bonnet E, Bour O, Odling NE, Davy P, Main I, Cowie P & Berkowitz B (2001) Scaling of fracture systems in geological media. *Reviews of Geophysics* 39(3):347-383.

Booth CJ (1988) Interpretation of Well and Field Data in a Heterogeneous Layered Aquifer Setting, Appalachian Plateau. *Ground Water* 26(5):596-606.

Boudreau BP (1996) The diffusive tortuosity of fine-grained unlithified sediments. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 60(16):3139-3142.

Boutt D, Diggins P & Mabee S (2010) A field study (Massachusetts, USA) of the factors controlling the depth of groundwater flow systems in crystalline fractured-rock terrain. *Hydrogeology Journal*:1-16.

Boving TB & Grathwohl P (2001) Tracer diffusion coefficients in sedimentary rocks: correlation to porosity and hydraulic conductivity. *Journal of Contaminant Hydrology* 53(1–2):85-100.

Bradbury KR & Rothschild ER (1985) A computerized technique for estimating the hydraulic conductivity of aquifers from specific capacity data. *Ground Water* 23(2):240-246.

Brown R, Ferris J, Jacob C, Knowles D, Meyer R, Skibitzke H & Theis CV (1963). *Methods of determining permeability, transmissibility and drawdown* (Water-Supply Paper 1536-I), US Geological Survey, p 243-341.

Burns ER, Williams CF, Ingebritsen SE, Voss CI, Spane FA & DeAngelo J (2015) Understanding heat and groundwater flow through continental flood basalt provinces: insights gained from alternative models of permeability/depth relationships for the Columbia Plateau, USA. *Geofluids* 15(1-2):120-138.

Carrier M-A, Lefebvre R, Boyaud C, Racicot J, Asare E, Aubut R & Fontaine R (2011). *Hydrogeological Assessment of the northern regions of Ghana (HAP): Final Technical Report* (INRS Research Report 1325), SNC-Lavalin/INRS Consortium, Submitted to CIDA.

Carrier M-A, Lefebvre R, Rivard C, Parent M, Ballard JM, Benoit N, Vigneault H, Beaudry C, Malet X, Laurencelle M, Gosselin J-S, Ladevèze P, Thériault R, Beaudin I, Michaud A, Pugin A, Morin R, Crow H, Gloaguen E, Bleser J, Martin A & Lavoie D (2013). *Portrait des ressources en eau souterraine en Montérégie Est, Québec, Canada* (Rapport final INRS R-1433), 318 p.

Castonguay S, Lavoie D, Dietrich J & Laliberte J-Y (2010) Structure and petroleum plays of the St. Lawrence Platform and Appalachians in southern Quebec: insights from interpretation of MRNQ seismic reflection data. *Bulletin of Canadian Petroleum Geology* 58(3):219-234.

Chesnaux R (2013) Regional recharge assessment in the crystalline bedrock aquifer of the Kenogami Uplands, Canada. *Hydrological Sciences Journal* 58(2):421-436.

Chiles J-P & Delfiner P (2009) *Geostatistics: modeling spatial uncertainty.* John Wiley & Sons.

Clark ID, Douglas M, Raven K & Bottomley D (2000) Recharge and Preservation of Laurentide Glacial Melt Water in the Canadian Shield. *Ground Water* 38(5):735-742.

Clark PU & Mix AC (2002) Ice sheets and sea level of the Last Glacial Maximum. *Quaternary Science Reviews* 21(1–3):1-7.

Cloutier V, Lefebvre R, Savard M, Bourque É & Therrien R (2006) Hydrogeochemistry and groundwater origin of the Basses-Laurentides sedimentary rock aquifer system, St. Lawrence Lowlands, Québec, Canada. *Hydrogeology Journal* 14(4):573-590.

Cloutier V, Lefebvre R, Savard MM & Therrien R (2010) Desalination of a sedimentary rock aquifer system invaded by Pleistocene Champlain Sea water and processes controlling groundwater geochemistry. *Environmental Earth Sciences* 59(5):977-994.

Coats KH & Smith BD (1964) Dead-end pore volume and dispersion in porous media. *Sot. Pet. Eng. J.* 4:73-84.

Conover WJ (1999) *Practical nonparametric statistics.* Wiley, 3rd edition. 584 p.

Cook PG (2003) *A guide to regional groundwater flow in fractured rock aquifers.* CSIRO Land and Water, Glen Osmond (SA, Australia). 115 p.

Cooley RL & Naff RL (1990). *Regression modeling of ground-water flow* (Chapter B4), *In* Techniques of Water-Resources Investigations, U. S. Geological Survey, Denver (CO, USA), 232 p.

Cooper HH, Jr. & Jacob CE (1946) A generalized graphical method for evaluating formation constants and summarizing well-field history. *Eos Trans. AGU* 27(4):526-534.

Cornaton F & Perrochet P (2006) Groundwater age, life expectancy and transit time distributions in advective-dispersive systems: 1. Generalized reservoir theory. *Advances in Water Resources* 29(9):1267-1291.

Cornaton FJ (2012) Transient water age distributions in environmental flow systems: The time-marching Laplace transform solution technique. *Water Resources Research* 48(3):W03524.

Courtois N, Lachassagne P, Wyns R, Blanchin R, Bougaïré FD, Somé S & Tapsoba A (2010) Large-Scale Mapping of Hard-Rock Aquifer Properties Applied to Burkina Faso. *Ground Water* 48(2):269-283.

Cremer CJ & Graf T (2015) Generation of dense plume fingers in saturated-unsaturated homogeneous porous media. *Journal of Contaminant Hydrology* 173:69-82.

Croteau A (2006) *Détermination de la distribution spatiale et temporelle de la recharge à l'aquifère régional transfrontalier du bassin versant de la rivière Châteauguay, Québec et États-Unis*. MSc Thesis (Institut national de la recherche scientifique, Québec, Canada). 345 p.

Croteau A, Nastev M & Lefebvre R (2010) Groundwater Recharge Assessment in the Chateauguay River Watershed. *Canadian Water Resources Journal* 35(4):451-468.

Crow H, Ladevèze P, Laurencelle M, Benoit N, Rivard C & Lefebvre R (2013). *Downhole geophysical logging and preliminary analyses of bedrock structural data for groundwater applications in the Montérégie Est area, Québec* (Open File 7077), Geological Survey of Canada, 51 p.

Crow H & Ladevèze P (2015). *Downhole geophysical data collected in 11 boreholes near St-Édouard-de-Lotbinière, Québec* (Open File 7768), Geological Survey of Canada, 32 p.

Daniel CC (1989). *Statistical analysis relating well yield to construction practices and siting of wells in the Piedmont and Blue Ridge Provinces of North Carolina* (Water-Supply Paper 2341-A), U.S. Geological Survey, Denver (CO, USA), 27 p.

Davis JC (2002) *Statistics and data analysis in geology.* John Wiley & sons, 3rd edition.

Davis SN & Turk LJ (1964) Optimum depth of wells in crystalline rocks. *Ground Water* 2(2):6-11.

Davy P, Le Goc R, Darcel C, Bour O, de Dreuzy JR & Munier R (2010) A likely universal model of fracture scaling and its consequence for crustal hydromechanics. *Journal of Geophysical Research-Solid Earth* 115:B10411.

de Dreuzy JR, Davy P & Bour O (2002) Hydraulic properties of two-dimensional random fracture networks following power law distributions of length and aperture. *Water Resources Research* 38(12):12-11-12-19.

de Dreuzy JR, Rapaport A, Babey T & Harmand J (2013) Influence of porosity structures on mixing-induced reactivity at chemical equilibrium in mobile/immobile Multi-Rate Mass Transfer (MRMT) and Multiple INteracting Continua (MINC) models. *Water Resources Research* 49(12):8511-8530.

Desaulniers DE & Cherry JA (1989) Origin and movement of groundwater and major ions in a thick deposit of Champlain Sea clay near Montréal. *Can. Geotech. J.* 26(1):80-89.

Diersch HJG (2014) *FEFLOW - Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media.* Springer Science & Business Media. 996 p.

Dionne JC (2001) Relative sea-level changes in the St. Lawrence estuary from deglaciation to present day. *Deglacial History and Relative Sea-Level Changes, Northern New England and Adjacent Canada,* (Geological Society of America Special Papers: 351), Weddle TK & Retelle MJ (Edit.), p 271-284.

Doherty J (1994) PEST: a unique computer program for model-independent parameter optimisation. *Water Down Under 94: Groundwater/Surface Hydrology Common Interest Papers; Preprints of Papers*:551.

Dolgopolova EN & Isupova MV (2011) Water and sediment dynamics at Saint Lawrence River mouth. *Water Resour* 38(4):453-469.

Domenico PA & Schwartz FW (1998) *Physical and Chemical Hydrogeology.* John Wiley & Sons Inc., New York, Second Edition. 506 p.

Driscoll FG (1986) *Groundwater and wells.* Johnson Division, St. Paul (MN, USA), 2nd Edition. 1108 p.

Dubé-Loubert H, Parent M & Brazeau A (2014). *Cartographie des dépôts de surface des bassins versants contigus des rivières Yamaska, Richelieu et de la baie Missisquoi*, Ministère des Ressources Naturelles, Québec, 21 p.

Duffield GM (2016a) *Representative values of hydraulic properties - AQTESOLV.* http://www.aqtesolv.com/aquifer-tests/aquifer_properties.htm (Accessed September 7th 2017).

Duffield GM (2016b) *Cooper and Jacob Solution for Confined Aquifers - AQTESOLV.* http://www.aqtesolv.com/cooper-jacob.htm (Accessed March 24th 2016).

Duffield GM (2016c) *Aquifer Tests - Aquifer Testing 101 - AQTESOLV.* http://www.aqtesolv.com/aquifer-tests/aquifer-tests.htm (Accessed March 3rd 2017).

Duhaime F, Benabdallah EM & Chapuis RP (2013) The Lachenaie clay deposit: some geochemical and geotechnical properties in relation to the salt-leaching process. *Can. Geotech. J.* 50(3):311-325.

Dyke AS (2004) An outline of North American deglaciation with emphasis on central and northern Canada. *Developments in Quaternary Sciences* 2:373-424.

Earnest E & Boutt D (2014) Investigating the role of hydromechanical coupling on flow and transport in shallow fractured-rock aquifers. *Hydrogeology Journal* 22(7):1573-1591.

Follin S & Stigsson M (2013) A transmissivity model for deformation zones in fractured crystalline rock and its possible correlation to in situ stress at the proposed high-level nuclear waste repository site at Forsmark, Sweden. *Hydrogeology Journal* 22(2):299-311.

Freeze RA & Cherry JA (1977) *Groundwater.* Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs (NJ, USA). 588 p.

Giudice GM & Broster BE (2006) Relict seawater as a source of stratified groundwater in glaciated estuarine valleys: an example from Fredericton Junction, New Brunswick. *Atlantic Geology* 42(2-3):139-150.

Globensky Y (1987). *Géologie des Basses Terres du Saint-Laurent* (Report MM 85-02), Gouvernement du Québec, Ministère de l'Energie et des ressources, Direction générale de l'exploration géologique et minérale, 63 p.

Godbout P-M (2013) *Géologie du quaternaire et hydrostratigraphie des dépôts meubles du bassin versant de la rivière Bécancour et des zones avoisinantes, Québec*. MSc Thesis (Université du Québec à Montréal, Montréal, Canada). 201 p.

Gomez JD & Wilson JL (2013) Age distributions and dynamically changing hydrologic systems: Exploring topography-driven flow. *Water Resources Research* 49(3):1503-1522.

Goode DJ (1996) Direct simulation of groundwater age. *Water Resources Research* 32(2):289-296.

Goode DJ (1999). *Age, double porosity, and simple reaction modifications for the MOC3D ground-water transport model* (Water-Resources Investigations Report 99-4041), *In* Water-Resources Investigations, U.S. Geological Survey, Lemoyne, PA, USA, 34 p.

Gouvernement du Québec (2017) *Système d'information hydrogéologique (SIH).* http://www.mddelcc.gouv.qc.ca/eau/souterraines/sih/ (Accessed April 13th 2017).

Greenbaum D (1992) Structural influences on the occurrence of groundwater in SE Zimbabwe. *Geological Society, London, Special Publications* 66(1):77-85.

Guerriero V, Mazzoli S, Iannace A, Vitale S, Carravetta A & Strauss C (2013) A permeability model for naturally fractured carbonate reservoirs. *Marine and Petroleum Geology* 40:115-134.

Guilbault J-P (1993) Quaternary Foraminiferal Stratigraphy in Sediments of the Eastern Champlain Sea Basin, Québec. *Géographie physique et Quaternaire* 47(1):43-68.

Gustafson G & Krásný J (1994) Crystalline Rock Aquifers: Their Occurrence, Use And Importance. *Hydrogeology Journal* 2(2):64-75.

Gy PM (1992) *Sampling of heterogeneous and dynamic material systems: theories of heterogeneity, sampling and homogenizing.* Elsevier, 1st edition. 652 p.

Hill MC (2006) The Practical Use of Simplicity in Developing Ground Water Models. *Ground Water* 44(6):775-781.

Hillaire-Marcel C (1981) Paléo-océanographie isotopique des mers post-glaciaires du Québec. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology* 35:63-119.

Hillaire-Marcel C (1988) Isotopic composition (18O, 13C, 14C) of biogenic carbonates in Champlain Sea sediments. *The Late Quaternary Development of the Champlain Sea Basin,* (Special Paper: 312), Gadd NR (Edit.) Geological Association of Canada, Vol 35, p 177-194.

Hooker JN, Laubach SE & Marrett R (2014) A universal power-law scaling exponent for fracture apertures in sandstones. *Geological Society of America Bulletin* 126(9-10):1340-1362.

Houben GJ (2015) Review: Hydraulics of water wells—flow laws and influence of geometry. *Hydrogeology Journal* 23(8):1633-1657.

Houghton JC (1988) Use of the truncated shifted Pareto distribution in assessing size distribution of oil and gas fields. *Math Geol* 20(8):907-937.

Hughes TJ (1998) *Ice Sheets.* Oxford University Press, New York. 343 p.

Huntley D, Nommensen R & Steffey D (1992) The use of specific capacity to assess transmissivity in fractured-rock aquifers. *Ground Water* 30(3):396-402.

Ingebritsen SE, Sanford WE & Neuzil CE (2006) *Groundwater in geologic processes.* Cambridge University Press, Cambridge (UK), Second Edition. 536 p.

Jiang X-W, Wang X-S & Wan L (2010) Semi-empirical equations for the systematic decrease in permeability with depth in porous and fractured media. *Hydrogeology Journal* 18(4):839-850.

Johnson CD (1999). *Effects of lithology and fracture characteristics on hydraulic properties in crystalline rock: Mirror Lake Research Site, Grafton County, New Hampshire*, *In* US Geological Survey Toxic Substances Hydrology Program, Proceedings of the Technical Meeting, US Geological Survey Water-Resources Investigations, U.S. Geological Survey, p 795-802.

Johnson NL, Kotz S & Balakrishnan N (1994) Pareto Distributions. *Continuous Univariate Distributions,* Wiley, 2nd Edition, Vol 1.

Kazemi GA, Lehr JH & Perrochet P (2006) *Groundwater age.* John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey. 346 p.

Keys WS (1990). *Borehole geophysics applied to ground-water investigations* (02-E2), *In* Techniques of Water-Resources Investigations, U.S. Geological Survey, 150 p.

Khader O & Novakowski K (2014) Impacts of Pleistocene glacial loading on abnormal pore-water pressure in the eastern Michigan Basin. *Geofluids* 14(2):200-220.

Kinney JJ (2009) *A probability and statistics companion.* John Wiley & Sons, Hoboken (NJ, USA). 260 p.

Knopman DS & Hollyday EF (1993) Variation in specific capacity in fractured rocks, Pennsylvania. *Ground Water* 31(1):135-145.

Kruseman GP & de Ridder NA (1990) *Analysis and evaluation of pumping test data.* International Institute for Land Reclamation and Improvement (ILRI), Wageningen, The Netherlands, Second Edition (Completely Revised). 377 p.

Kuang X & Jiao JJ (2014) An integrated permeability-depth model for Earth's crust. *Geophys. Res. Lett.* 41(21):7539–7545.

Lachassagne P, Wyns R, Bérard P, Bruel T, Chéry L, Coutand T, Desprats J-F & Le Strat P (2001) Exploitation of high-yields in hard-rock aquifers: Downscaling methodology combining gis and multicriteria analysis to delineate field prospecting zones. *Ground Water* 39(4):568-581.

Ladevèze P, Laurencelle M, Lefebvre R, Rouleau A, Crow H & Rivard C (2013) Fracture systems controls on fluid flow in the regional sedimentary rock aquifer system of Montérégie Est, southern Québec, Canada. *GeoMontreal 2013, 11th Joint CGS/IAH-CNC Groundwater Conference.* (Montréal, Canada, September 29-October 3).

Ladevèze P, Rivard C, Lefebvre R, Lavoie D, Parent M, Malet X, Bordeleau G & Gosselin J-S (2016). *Travaux de caractérisation hydrogéologique dans la plateforme sédimentaire du Saint-Laurent, région de Saint-Édouard-de-Lotbinière, Québec* (Open File 8036), Geological Survey of Canada, 112 p.

Ladevèze P, Rivard C, Lavoie D, Séjourné S, Lefebvre R & Bordeleau G (2018) Faults and natural fractures controls on upward fluid migration: insights from a shale gas play in the St. Lawrence Platform, Canada. Accepted for publication in May 2018 by *Hydrogeology Journal*.

Lafleur J, Giroux F & Huot M (1987) Field permeability of the weathered Champlain clay crust. *Can. Geotech. J.* 24(4):581-589.

Lamarche L (2005) *Histoire géologique holocène du lac Saint-Pierre et de ses ancêtres*. MSc Thesis (Université du Québec à Montréal, Montréal, Canada).

Lamarche L (2011) *Évolution paléoenvironnementale de la dynamique quaternaire dans la région de Québec : application en modélisation tridimensionnelle et hydrogéologique*. PhD Thesis (Institut national de la recherche scientifique, Québec, Canada). 147 p.

Larocque M, Gagné S, Tremblay L & Meyzonnat G (2013). *Projet de connaissance des eaux souterraines du bassin versant de la rivière Bécancour et de la MRC de Bécancour - Rapport final* (Rapport déposé au Ministère du Développement durable, de l'Environnement, de la Faune et des Parcs), *In* Rapport final présenté au Ministère du Développement durable, de l'Environnement, de la Faune et des Parcs, Université du Québec à Montréal, Québec, Canada, 219 p.

Larsen B, Grunnaleite I & Gudmundsson A (2010) How fracture systems affect permeability development in shallow-water carbonate rocks: An example from the Gargano Peninsula, Italy. *Journal of Structural Geology* 32(9):1212-1230.

Laurencelle M, Morin R, Lefebvre R, Rivard C, Paradis D, Lavoie D, Benoit N, Carrier MA & Beaudry C (2011) Initial characterization of fractures and hydraulic properties of the Montérégie Est rock aquifer system. *GeoHydro 2011, First Joint Meeting of the Canadian Quaternary Association and Canadian Chapter of the International Association of Hydrogeologists.* (Québec, Canada, August 28-31, Oral presentation & Proceedings).

Laurencelle M, Lefebvre R, Rivard C, Parent M, Ladevèze P, Beaudry C, Carrier M-A & Benoit N (2013) Modeling the evolution of a regional fractured-rock aquifer system in southern Quebec following the last deglaciation. *GeoMontreal 2013, 11th Joint CGS/IAH-CNC Groundwater Conference.* (Montréal, Canada, September 29-October 3, Poster & Proceedings).

Laurencelle M, Lefebvre R, Parent M, Ladevèze P, Rivard C, Benoit N & Carrier MA (2014) Modeling the palaeo-hydrogeological evolution of a Canada-U.S. transboundary regional fractured-rock aquifer system following the last deglaciation. *41st IAH International Congress "Groundwater: Challenges and Strategies".* (Marrakech, Morocco, September 15-19, Oral presentation).

Laurencelle M & Lefebvre R (2018, in prep.-a) Reliability of transmissivity estimates from specific capacity data. Manuscript in preparation.

Laurencelle M & Lefebvre R (2018, in prep.-b) Regional-scale hydraulic-conductivity vertical profiles derived from specific capacity tests in fractured rock aquifers freed from well-drillers' sampling bias. Manuscript in preparation.

Lavigne MA (2006) *Modélisations numériques de l'écoulement régional de l'eau souterraine dans le bassin versant de la rivière Châteauguay*. MSc Thesis (Institut national de la recherche scientifique, Québec, Canada). 109 p.

Lavigne MA, Nastev M & Lefebvre R (2010) Numerical simulation of groundwater flow in the Chateauguay River aquifers. *Canadian Water Resources Journal* 35(4):469-486.

Lefebvre R, Ballard J-M, Carrier M-A, Vigneault H, Beaudry C, Berthot L, Légaré-Couture G, Parent M, Laurencelle M, Malet X, Therrien A, Michaud A, Desjardins J, Drouin A, Cloutier MH, Grenier J, Bourgault M-A, Larocque M, Pellerin S, Graveline M-H, Janos D & Molson J (2015). *Portrait des ressources en eau souterraine en Chaudière-Appalaches, Québec, Canada* (Rapport final INRS R-1580), 318 p.

Lefebvre R & Raynauld M (2017). *Revue de littérature scientifique et réglementaire des normes du chapitre V du Règlement sur le prélèvement des eaux et leur protection (RPEP) - Site de forage destiné à rechercher ou exploiter du pétrole ou du gaz naturel* (Rapport final révisé INRS R-1748 soumis au MDDELCC en août 2017), INRS, 56 p. et deux annexes électroniques.

Lemieux JM, Sudicky EA, Peltier WR & Tarasov L (2008a) Dynamics of groundwater recharge and seepage over the Canadian landscape during the Wisconsinian glaciation. *Journal of Geophysical Research-Earth Surface* 113(F1):F01011.

Lemieux JM, Sudicky EA, Peltier WR & Tarasov L (2008b) Simulating the impact of glaciations on continental groundwater flow systems: 2. Model application to the Wisconsinian glaciation over the Canadian landscape. *Journal of Geophysical Research-Earth Surface* 113(F3):F03018.

Lemieux JM & Sudicky EA (2011) Glaciations and groundwater flow systems: Insights from a continental scale model. *GeoHydro 2011, Joint Meeting of the Canadian Quaternary Association and the Canadian Chapter of the International Association of Hydrogeologists.* (Québec, Canada, August 28-31).

Leroueil S, Tavenas F & Bihan J-PL (1983) Propriétés caractéristiques des argiles de l'est du Canada. *Can. Geotech. J.* 20(4):681-705.

Leroueil S, Bouclin G, Tavenas F, Bergeron L & Rochelle PL (1990) Permeability anisotropy of natural clays as a function of strain. *Can. Geotech. J.* 27(5):568-579.

Li B, Liu R & Jiang Y (2016) A multiple fractal model for estimating permeability of dual-porosity media. *Journal of Hydrology* 540:659-669.

Loiselle M & Evans D (1991) Fracture permeability and density distributions in coastal Maine. *1991 Focus conference on Eastern Regional Ground Water Issues.* (Dublin, OH, USA, National Water Well Association, p 205-217.

Loiselle M & Evans D (1995) Fracture density distributions and well yields in coastal Maine. *Ground Water* 33(2):190-196.

Long JCS, Remer JS, Wilson CR & Witherspoon PA (1982) Porous media equivalents for networks of discontinuous fractures. *Water Resources Research* 18(3):645-658.

Mabee SB (1999) Factors Influencing Well Productivity in Glaciated Metamorphic Rocks. *Ground Water* 37(1):88-97.

Mace RE (1997) Determination of transmissivity from specific capacity tests in a karst aquifer. *Ground Water* 35(5):738-742.

Mace RE (2001). *Estimating transmissivity using specific-capacity data* (Geological Circular 01-2), The University of Texas at Austin, 44 p.

Maharjan M (2011) *Interpretation of domestic water well production data as a tool for detection of transmissive bedrock fractured zones under cover of the glacial formations in Geauga County, Ohio*. MSc Thesis (Kent State University, Kent, OH, United States). 69 p.

Matta CF, Massa L, Gubskaya AV & Knoll E (2010) Can one take the logarithm or the sine of a dimensioned quantity or a unit? Dimensional analysis involving transcendental functions. *Journal of Chemical Education* 88(1):67-70.

McIntosh JC, Schlegel ME & Person MA (2012) Glacial impacts on hydrologic processes in sedimentary basins: evidence from natural tracer studies. *Geofluids* 12(1):7-21.

McLin SG (2005) Estimating aquifer transmissivity from specific capacity using MATLAB. *Ground Water* 43(4):611-614.

Meier PM, Carrera J & Sanchez-Vila X (1999) A numerical study on the relationship between transmissivity and specific capacity in heterogeneous aquifers. *Ground Water* 37(4):611-617.

Merin IS (1992) Conceptual model of ground water flow in fractured siltstone based on analysis of rock cores, borehole geophysics, and thin sections. *Ground Water Monitoring & Remediation* 12(4):118-125.

Millero FJ, Feistel R, Wright DG & McDougall TJ (2008) The composition of standard seawater and the definition of the reference-composition salinity scale. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers* 55(1):50-72.

Mishra PK & Neuman SP (2011) Saturated-unsaturated flow to a well with storage in a compressible unconfined aquifer. *Water Resources Research* 47(5):W05553.

Moench AF (1984) Double-porosity models for a fissured groundwater reservoir with fracture skin. *Water Resources Research* 20(7):831-846.

Moench AF (1997) Flow to a well of finite diameter in a homogeneous, anisotropic water table aquifer. *Water Resources Research* 33(6):1397-1407.

Molson JW & Frind EO (2014). *SALTFLOW: Density dependent flow and mass transport model in three dimensions: User Guide* (Version 3.0), Dept. of Geology & Geological Engineering, Université Laval, Quebec City (Canada), 81 p.

Montcoudiol N, Molson J & Lemieux JM (2014) Groundwater geochemistry of the Outaouais Region (Québec, Canada): a regional-scale study. *Hydrogeology Journal* 23(2):377-396.

Moore RB, Schwarz GE, Clark SF, Walsh GJ & Degnan JR (2002). *Factors related to well yield in the fractured-bedrock aquifer of New Hampshire* (Professional Paper 1660), U.S. Geological Survey, 34 p.

Morgan PP (1994) *SEAWATER: A library of MATLAB computational routines for the properties of sea water: Version 1.2.* CSIRO Marine Laboratories.

Mortimer L, Aydin A, Simmons CT & Love AJ (2011) Is in situ stress important to groundwater flow in shallow fractured rock aquifers? *Journal of Hydrology* 399(3-4):185-200.

Nastev M, Savard MM, Lapcevic P, Lefebvre R & Martel R (2004) Hydraulic properties and scale effects investigation in regional rock aquifers, south-western Quebec, Canada. *Hydrogeology Journal* 12(3):257-269.

Neuzil C (1995) Abnormal pressures as hydrodynamic phenomena. *American Journal of Science* 295(6):742-786.

Neuzil CE (2012) Hydromechanical effects of continental glaciation on groundwater systems. *Geofluids* 12(1):22-37.

Nicholls RJ & Cazenave A (2010) Sea-level rise and its impact on coastal zones. *Science* 328(5985):1517-1520.

O'Shaughnessy V & Garga VK (1994) The hydrogeological and contaminant-transport properties of fractured Champlain Sea clay in Eastern Ontario. Part 1. Hydrogeological properties. *Can. Geotech. J.* 31(6):885-901.

Occhietti S, ChartierH M, Hillaire-Marcel C, Cournoyer M, Cumbaa SL & Harington R (2001a) Paléoenvironnements de la Mer de Champlain dans la région de Québec, entre 11 300 et 9750 BP : le site de Saint-Nicolas. *Géographie physique et Quaternaire* 55(1):23-46.

Occhietti S, Parent M, Shilts WW, Dionne JC, Govare É & Harmand D (2001b) Late Wisconsinan glacial dynamics, deglaciation, and marine invasion in southern Québec. *Deglacial History and Relative Sea-Level Changes, Northern New England and Adjacent Canada,* (Geological Society of America Special Papers: 351), Weddle TK & Retelle MJ (Edit.), p 243-270.

Occhietti S & Richard PJ (2003) Effet réservoir sur les âges 14 C de la Mer de Champlain à la transition Pléistocène-Holocène : révision de la chronologie de la déglaciation au Québec méridional. *Géographie physique et Quaternaire* 57(2-3):115-138.

Oda M (1986) An equivalent continuum model for coupled stress and fluid flow analysis in jointed rock masses. *Water Resources Research* 22(13):1845-1856.

OEIS Foundation Inc. (2017) *The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences: OEIS A091723.* https://oeis.org/A091723 (Accessed March 27th 2017).

Ortega OJ, Marrett RA & Laubach SE (2006) A scale-independent approach to fracture intensity and average spacing measurement. *AAPG bulletin* 90(2):193-208.

Osborne PS (1993). *Suggested operating procedures for aquifer pumping tests* (EPA/540/S-93/503), *In* EPA, United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA, 23 p.

Ouellet M, Lamontagne C & Labbé J-Y (2011) Le programme d'acquisition de connaissances sur les eaux souterraines du Québec et ses retombées. *GeoHydro 2011, Joint Meeting of the Canadian Quaternary Association and the Canadian Chapter of the International Association of Hydrogeologists.* (Québec, Canada, August 28-31).

Paillet F, Barton C, Luthi S, Rambow F & Zemanek J (1990) Borehole Imaging. SPWLA Reprint Series. *Society of Professional Well Log Analysts*.

Palmer S, Campeau S, Cloutier V, Daigneault R, Larocque M, Lefebvre R, Lemieux J-M, Molson J, Rivard C, Rouleau A & Therrien R (2011) Collaborative approaches to groundwater knowledge acquisition in Quebec: interregional characterization. *GeoHydro 2011, Joint Meeting of the Canadian Quaternary Association and the Canadian Chapter of the International Association of Hydrogeologists.* (Québec, Canada, August 28-31).

Papadopulos IS & Cooper HH (1967) Drawdown in a well of large diameter. *Water Resources Research* 3(1):241-244.

Parent M & Occhietti S (1988) Late Wisconsinan Deglaciation and Champlain Sea Invasion in the St. Lawrence Valley, Québec. *Géographie physique et Quaternaire* 42(3):215-246.

Parent M & Occhietti S (1999) Late Quaternary History of the White Mountains, New Hampshire and Adjacent Southeastern Québec. *Géographie physique et Quaternaire* 53(1):117-135.

Pelletier M (2008). *Évolution spatiale et temporelle de la dynamique et de la géochimie des sédiments du lac Saint-Pierre* (Rapport scientifique et technique ST-240), Environnement Canada, 94 p.

Peltier WR & Fairbanks RG (2006) Global glacial ice volume and Last Glacial Maximum duration from an extended Barbados sea level record. *Quaternary Science Reviews* 25(23–24):3322-3337.

Peltier WR, Argus DF & Drummond R (2015) Space Geodesy Constrains Ice-Age Terminal Deglaciation: The Global ICE-6G_C (VM5a) Model. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 120(1):450-487.

Perret D, Locat J & Leroueil S (1995) Strength development with burial in fine-grained sediments from the Saguenay Fjord, Quebec. *Can. Geotech. J.* 32(2):247-262.

Person M, Bense V, Cohen D & Banerjee A (2012) Models of ice-sheet hydrogeologic interactions: a review. *Geofluids* 12(1):58-78.

Petit JR, Jouzel J, Raynaud D, Barkov NI, Barnola JM, Basile I, Bender M, Chappellaz J, Davis M, Delaygue G, Delmotte M, Kotlyakov VM, Legrand M, Lipenkov VY, Lorius C, Pepin L, Ritz C, Saltzman E & Stievenard M (1999) Climate and atmospheric history of the past 420,000 years from the Vostok ice core, Antarctica. *Nature* 399(6735):429-436.

Pontlevoy O (2004) *Modélisation hydrogéologique pour supporter la gestion du système aquifère de la région de Ville-Mercier*. MSc Thesis (Institut national de la recherche scientifique, Québec, Canada). 164 p.

Pool M, Post VEA & Simmons CT (2015) Effects of tidal fluctuations and spatial heterogeneity on mixing and spreading in spatially heterogeneous coastal aquifers. *Water Resources Research* 51(3):1570-1585.

Post VA & Simmons C (2010) Free convective controls on sequestration of salts into low-permeability strata: insights from sand tank laboratory experiments and numerical modelling. *Hydrogeology Journal* 18(1):39-54.

Post VEA & von Asmuth JR (2013) Review: Hydraulic head measurements—new technologies, classic pitfalls. *Hydrogeology Journal* 21(4):737-750.

Price NJ (1966) *Fault and joint development: in brittle and semi-brittle rock.* Elsevier.

Provost AM, Voss CI & Neuzil CE (2012) Glaciation and regional groundwater flow in the Fennoscandian shield. *Geofluids* 12(1):79-96.

Pruess K (1992). *Brief guide to the MINC - method for modeling flow and transport in fractured media*, Lawrence Berkeley Lab., California (United States).

Quigley RM (1980) Geology, mineralogy, and geochemistry of Canadian soft soils: a geotechnical perspective. *Can. Geotech. J.* 17(2):261-285.

Quigley RM, Gwyn QHJ, White OL, Rowe RK, Haynes JE & Bohdanowicz A (1983) Leda clay from deep boreholes at Hawkesbury, Ontario. Part I: Geology and geotechnique. *Can. Geotech. J.* 20(2):288-298.

R Core Team (2017) R: A language and environment for statistical computing. (R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria).

Ranjram M, Gleeson T & Luijendijk E (2015) Is the permeability of crystalline rock in the shallow crust related to depth, lithology or tectonic setting? *Geofluids* 15(1-2):106-119.

Razack M & Huntley D (1991) Assessing transmissivity from specific capacity in a large and heterogeneous alluvial aquifer. *Ground Water* 29(6):856-861.

Razack M & Lasm T (2006) Geostatistical estimation of the transmissivity in a highly fractured metamorphic and crystalline aquifer (Man-Danane Region, Western Ivory Coast). *Journal of Hydrology* 325(1-4):164-178.

Rehfeldt KR, Boggs JM & Gelhar LW (1992) Field study of dispersion in a heterogeneous aquifer: 3. Geostatistical analysis of hydraulic conductivity. *Water Resources Research* 28(12):3309-3324.

Richard SK, Chesnaux R, Rouleau A & Coupe RH (2016) Estimating the reliability of aquifer transmissivity values obtained from specific capacity tests: examples from the Saguenay-Lac-Saint-Jean aquifers, Canada. *Hydrological Sciences Journal* 61(1):173-185.

Risser DW (2010). *Factors affecting specific-capacity tests and their application - A study of six low-yielding wells in fractured-bedrock aquifers in Pennsylvania* (Scientific Investigations Report 2010–5212), U.S. Geological Survey, 44 p.

Rivard C, Michaud Y, Lefebvre R, Deblonde C & Rivera A (2008) Characterization of a Regional Aquifer System in the Maritimes Basin, Eastern Canada. *Water Resources Management* 22(11):1649-1675.

Rodrigues CG (1992) Successions of invertebrate microfossils and the late quaternary deglaciation of the central St Lawrence Lowland, Canada and United States. *Quaternary Science Reviews* 11(5):503-534.

Ross M (2004) *Stratigraphie et architecture des formations quaternaires au nord-ouest de Montréal: applications en hydrogéologie régionale*. PhD Thesis (Institut national de la recherche scientifique, Québec, Canada). 212 p.

Ross M, Parent M, Benjumea B & Hunter J (2006) The late Quaternary stratigraphic record northwest of Montreal: regional ice-sheet dynamics, ice-stream activity, and early deglacial events. *Canadian Journal of Earth Sciences* 43(4):461-485.

Rotzoll K & El-Kadi A (2008) Estimating hydraulic conductivity from specific capacity for Hawaii aquifers, USA. *Hydrogeology Journal* 16(5):969-979.

Rovey CW & Cherkauer DS (1995) Scale dependency of hydraulic conductivity measurements. *Ground Water* 33(5):769-780.

Rushton KR & Rao SVR (1988) Groundwater flow through a Miliolite limestone aquifer. *Hydrological Sciences Journal* 33(5):449-464.

Rutqvist J (2015) Fractured rock stress-permeability relationships from in situ data and effects of temperature and chemical-mechanical couplings. *Geofluids* 15(1-2):48-66.

Saar MO & Manga M (2004) Depth dependence of permeability in the Oregon Cascades inferred from hydrogeologic, thermal, seismic, and magmatic modeling constraints. *Journal of Geophysical Research-Solid Earth* 109(B4):B04204.

Salcedo-Castro J, Bourgault D & deYoung B (2011) Circulation induced by subglacial discharge in glacial fjords: Results from idealized numerical simulations. *Continental Shelf Research* 31(13):1396-1406.

Sanford W (2010) Calibration of models using groundwater age. *Hydrogeology Journal*:1-4.

Sanford WE (2017) Estimating regional-scale permeability–depth relations in a fractured-rock terrain using groundwater-flow model calibration. *Hydrogeology Journal* 25(2):405-419.

Schulze-Makuch D (2005) Longitudinal dispersivity data and implications for scaling behavior. *Ground Water* 43(3):443-456.

Scott JS (2003). *A review of the geology and geotechnical characteristics of Champlain Sea clays of the Ottawa River Valley with reference to slope failures* (Open File 4475), Geological Survey of Canada, 33 p.

Simmons C (2005) Variable density groundwater flow: From current challenges to future possibilities. *Hydrogeology Journal* 13(1):116-119.

Simmons CT, Narayan KA & Wooding RA (1999) On a test case for density-dependent groundwater flow and solute transport models: The Salt Lake Problem. *Water Resources Research* 35(12):3607-3620.

Simon KM, James TS, Henton JA & Dyke AS (2016) A glacial isostatic adjustment model for the central and northern Laurentide Ice Sheet based on relative sea level and GPS measurements. *Geophysical Journal International* 205(3):1618-1636.

Singhal BBS & Gupta RP (2010) Principles of groundwater flow and solute transport. *Applied Hydrogeology of Fractured Rocks,* Springer Science & Business Media, Second Edition, p 115-138.

Slivitzky A & St-Julien P (1985). *Compilation geologique de la region de l'Estrie-Beauce* (MM 85-04), Direction générale de l'exploration géologique et minérale, Québec, Canada, 40 p.

Snow DT (1965) *A parallel plate model of fractured permeable media*. PhD Thesis (Univ. of California, Berkeley, CA, United States). 331 p.

Snow DT (1968) Rock fracture spacings, openings, and porosities. *Journal of Soil Mechanics & Foundations Div* 94(1):73-91.

Snow DT (1969) Anisotropic permeability of fractured media. *Water Resources Research* 5(6):1273-1289.

Soong TT (2004) *Fundamentals of probability and statistics for engineers.* John Wiley & Sons, Chichester (UK). 391 p.

Srivastav S, Lubczynski M & Biyani A (2007) Upscaling of transmissivity, derived from specific capacity: a hydrogeomorphological approach applied to the Doon Valley aquifer system in India. *Hydrogeology Journal* 15(7):1251-1264.

Sterckx A (2013) *Étude des facteurs influençant le rendement des puits d'alimentation de particuliers qui exploitent le roc fracturé en Outaouais, Québec, Canada*. MSc Thesis (Université Laval, Québec, Canada). 78 p.

Stokes CR, Tarasov L & Dyke AS (2012) Dynamics of the North American Ice Sheet Complex during its inception and build-up to the Last Glacial Maximum. *Quaternary Science Reviews* 50:86-104.

Suckow A (2014) The age of groundwater – Definitions, models and why we do not need this term. *Applied Geochemistry* 50:222-230.

Sweet HR, Rosenthal G & Atwood DF (1990). *Water Level Monitoring - Achievable Accuracy and Precision* (ASTM STP 1053), *In* Ground water and vadose zone monitoring, ASTM International, Philadelphia, PA, USA, p 178-192.

Sykes JF, Normani SD & Yin Y (2011). *Hydrogeologic Modelling* (NWMO DGR-TR-2011-16), Nuclear Waste Management Organization, 255 p.

Syvitski JPM, Lewis CFM & Piper DJW (1996) Palaeoceanographic information derived from acoustic surveys of glaciated continental margins: examples from eastern Canada. *Geological Society, London, Special Publications* 111(1):51-76.

Talbot CJ (1999) Ice ages and nuclear waste isolation. *Engineering Geology* 52(3-4):177-192.

Tavenas F, Jean P, Leblond P & Leroueil S (1983) The permeability of natural soft clays. Part II: Permeability characteristics. *Can. Geotech. J.* 20(4):645-660.

Theis CV (1935) The relation between the lowering of the Piezometric surface and the rate and duration of discharge of a well using ground-water storage. *Eos, Transactions American Geophysical Union* 16(2):519-524.

Theis CV, Brown RH & Meyer RR (1963) Estimating the transmissibility of aquifers from the specific capacities of wells. *Methods of determining permeability, transmissibility and drawdown*, Bentall R (Edit.) USGS Water-Supply Paper 1536-I, p 331-341.

Thériault R & Beauséjour S (2012) *Geological map of Québec (2012 Edition).* Ressources Naturelles Québec (DV 2012-07).

Torrance JK (1988) Mineralogy, pore-water chemistry and geotechnical behaviour of Champlain Sea and related sediments. *The late Quaternary development of the Champlain Sea basin. Edited by NR Gadd. Geological Association of Canada, Special Paper* 35:259-275.

Tóth J (2009) *Gravitational systems of groundwater flow: theory, evaluation, utilization.* Cambridge University Press, New York (NY, USA). 297 p.

Trainer F (1988) Plutonic and metamorphic rocks (Chapter 40). *Hydrogeology: The Geology of North America,* Geological Society of America, Boulder, Colorado, USA, Vol O-2, p 367-380.

Tran Ngoc TD, Konstantinovskaya E, Lefebvre R & Malo M (2011). *Caractérisation hydrogéologique et pétrophysique des aquifères salins profonds de la région de Bécancour pour leur potentiel de séquestration géologique du CO2* (INRSCO2-2011-V2.10/R-1318), Institut national de la recherche scientifique, 54 p.

Tran Ngoc TD, Lefebvre R, Konstantinovskaya E & Malo M (2014) Characterization of deep saline aquifers in the Bécancour area, St. Lawrence Lowlands, Québec, Canada: implications for CO2 geological storage. *Environmental Earth Sciences* 72(1):119-146.

Tremblay A & Pinet N (2016) Late Neoproterozoic to Permian tectonic evolution of the Quebec Appalachians, Canada. *Earth-Science Reviews* 160:131-170.

Tsang YW (1992) Usage of “Equivalent apertures” for rock fractures as derived from hydraulic and tracer tests. *Water Resources Research* 28(5):1451-1455.

Van Genuchten MT & Alves WJ (1982). *Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation* (Technical Bulletin Number 1661), USDA, Agricultural Research Service, Beltsville, MD, USA, 101 p.

Verbovsek T (2008) Estimation of transmissivity and hydraulic conductivity from specific capacity and specific capacity index in dolomite aquifers. *Journal of Hydrologic Engineering* 13(9):817-823.

Voss CI & Souza WR (1987) Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow freshwater-saltwater transition zone. *Water Resources Research* 23(10):1851-1866.

Wallroth T & Rosenbaum MS (1996) Estimating the spatial variability of specific capacity from a Swedish regional database. *Marine and Petroleum Geology* 13(4):457-461.

Wang Z, Rutqvist J & Dai Y (2013) A multi-continuum method for studying the effect of inactive fractures on solute transport in 2-D discrete fracture network. *Computer Modeling in Engineering & Sciences* 92(6):539-556.

Wangen M (1992) Pressure and temperature evolution in sedimentary basins. *Geophysical Journal International* 110(3):601-613.

Warren JE & Root PJ (1963) The behavior of naturally fractured reservoirs. *Old SPE Journal* 3(3):245-255.

Wassenaar L, Brand U & Terasmae J (1988) Geochemical and paleoecological investigations using invertebrate macrofossils of the late Quaternary Champlain Sea, Ontario and Quebec. *Geological Association of Canada, Special Paper* 35:195-205.

Wei ZQ, Egger P & Descoeudres F (1995) Permeability predictions for jointed rock masses. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts* 32(3):251-261.

Weisstein EW (2017) *"Exponential Integral." From MathWorld--A Wolfram Web Resource.* http://mathworld.wolfram.com/ExponentialIntegral.html (Accessed March 27th 2017).

Williams H (1979) Appalachian Orogen in Canada. *Canadian Journal of Earth Sciences* 16(3):792-807.

Williams H (1995) Temporal and spatial divisions. *Geology of the Appalachian-Caledonian Orogen in Canada and Greenland,* (Geology of Canada: no. 6), Williams H (Edit.) Geological Survey of Canada, Ottawa (Canada), p 21-44.

Williams JH & Johnson CD (2004) Acoustic and optical borehole-wall imaging for fractured-rock aquifer studies. *Journal of Applied Geophysics* 55(1):151-159.

Wilson ES (2005) Specific Capacity. *Water Encyclopedia,* John Wiley & Sons, Inc., Vol 5, p 460-461.

Witherspoon PA, Wang JSY, Iwai K & Gale JE (1980) Validity of cubic law for fluid flow in a deformable rock fracture. *Water Resources Research* 16(6):1016-1024.

Wladis D, Jönsson P & Wallroth T (1997). *Regional characterization of hydraulic properties of rock using well test data* (SKB Technical Report 97-29), Chalmers University of Technology, Department of Geology, Göteborg, Sweden, 40 p.

Wong P-z, Koplik J & Tomanic JP (1984) Conductivity and permeability of rocks. *Physical Review B* 30(11):6606-6614.

Woodley MA (1996) *An Investigation of pore water in Champlain sea deposits at Mer Bleue Ottawa, Canada*. MSc Thesis (Carleton University, Ottawa, Canada). 110 p.

Wright EP (1992) The hydrogeology of crystalline basement aquifers in Africa. *Geological Society London Special Publications* 66(1):1-27.

Wyns R, Gourry J, Baltassat J & Lebert F (1999) Caractérisation multiparamètres des horizons de subsurface (0–100 m) en contexte de socle altéré. *2ème Colloque GEOFCAN (BRGM, IRD, UPMC).* (Orléans, France, September 1999), p 105-110.

Wyns R, Baltassat J-M, Lachassagne P, Legchenko A, Vairon J & Mathieu F (2004) Application of proton magnetic resonance soundings to groundwater reserve mapping in weathered basement rocks (Brittany, France). *Bulletin de la Societe Geologique de France* 175(1):21-34.

Wyns R, Dewandel B & Lachassagne P (2015) Origin of fracturation in hard-rock aquifers: what are the factors that control the properties of the fissured horizon? *Vingtièmes journées techniques du Comité Français d'Hydrogéologie de l'AIH, session "Aquifères de socle : le point sur les concepts et les applications opérationnelles".* (La-Roche-sur-Yon, France, June 2015).

Xie Y, Simmons CT, Werner AD & Diersch H-JG (2012) Prediction and uncertainty of free convection phenomena in porous media. *Water Resources Research* 48(2):W02535.

Yager R, Voss C & Southworth S (2009) Comparison of alternative representations of hydraulic-conductivity anisotropy in folded fractured-sedimentary rock: modeling groundwater flow in the Shenandoah Valley (USA). *Hydrogeology Journal* 17(5):1111-1131.

Zaninetti L & Ferraro M (2008) On the truncated Pareto distribution with applications. *Cent Eur J Phys* 6(1):1-6.

Zhang C, Shu L, Lu C, Appiah-Adjei EK & Wang X (2015) Experimental determination of fractures and conduits and the applicability of Cubic law in closed fractures. *Experimental Thermal and Fluid Science* 69:1-7.

Zhang X & Sanderson DJ (1996) Effects of stress on the two-dimensional permeability tensor of natural fracture networks. *Geophysical Journal International* 125(3):912-924.

Zhang X, Sanderson DJ, Harkness RM & Last NC (1996) Evaluation of the 2-D permeability tensor for fractured rock masses. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts* 33(1):17-37.

Zimmerman RW & Bodvarsson GS (1996) Hydraulic conductivity of rock fractures. *Transport in Porous Media* 23(1):1-30.

Zuber A & Motyka J (1994) Matrix porosity as the most important parameter of fissured rocks for solute transport at large scales. *Journal of Hydrology* 158(1–2):19-46.

ANNEXES

Les annexes qui suivent complètent la documentation des travaux réalisés au cours de cette thèse en fournissant l'essentiel des données et codes informatiques qui ont été nécessaires à la production des résultats présentés dans les chapitres 6 à 8. Les annexes électroniques assurent ainsi la pérennité de ces données et codes informatiques. Ces annexes sont diffusées dans un souci de transparence, afin que le lecteur intéressé soit en mesure de vérifier et de reproduire l'ensemble des résultats présentés dans la thèse. Enfin, la disponibilité de ces données ainsi que des codes sources des outils informatiques développés par l'auteur de la thèse facilitera grandement la poursuite d'autres travaux, par l'auteur de la thèse bien sûr, mais aussi par tout lecteur intéressé à mettre à profit les données et outils informatiques mis à sa disposition.

Annexe A0.1 : Laurencelle et al. (2013) – Acte de conférence et affiche

[FR: *Documents téléchargeables (en anglais) → voir les fichiers accompagnant la thèse*]

[EN: *Downloadable as separate documents → see the files accompanying the thesis*]

FR: Fichiers PDF de l'acte de conférence et de l'affiche préparés pour la conférence annuelle « GéoMontréal 2013 » du chapitre canadien de l'AIH qui s'est tenue à la fin septembre 2013.

EN: PDF files of the conference proceedings and poster prepared for the "GéoMontréal 2013" annual conference of the IAH Canadian National Chapter (IAH-CNC) in late September 2013.

Reference:

Laurencelle M, Lefebvre R, Rivard C, Parent M, Ladevèze P, Beaudry C, Carrier M-A & Benoit N (2013) Modeling the evolution of a regional fractured-rock aquifer system in southern Quebec following the last deglaciation. *GeoMontreal 2013, 11th Joint CGS/IAH-CNC Groundwater Conference*. (Montréal, Canada, September 29–October 3, Poster & Proceedings).

Annexe A0.2 : Laurencelle et al. (2011) – Acte de conférence et diapositives

[FR: *Documents téléchargeables (en anglais) → voir les fichiers accompagnant la thèse*]

[EN: *Downloadable as separate documents → see the files accompanying the thesis*]

FR: Fichiers PDF de l'acte de conférence et des diapositives préparés pour la conférence annuelle « GeoHydro 2011 » du chapitre canadien de l'AIH qui s'est tenue à la fin août 2011.

EN: PDF files of the conference proceedings and slides prepared for the "GeoHydro 2011" annual conference of the IAH Canadian National Chapter (IAH-CNC) in late August 2011.

Reference:

Laurencelle M, Morin R, Lefebvre R, Rivard C, Paradis D, Lavoie D, Benoit N, Carrier MA & Beaudry C (2011) Initial characterization of fractures and hydraulic properties of the Montérégie Est rock aquifer system. *GeoHydro 2011, First Joint Meeting of the Canadian Quaternary Association and Canadian Chapter of the International Association of Hydrogeologists*. (Québec, Canada, August 28–31, Oral presentation & Proceedings).

Annexe A0.3 : Laurencelle et al. (2014) – Diapositives

[FR: *Document téléchargeable (en anglais) → voir les fichiers accompagnant la thèse*]

[EN: *Downloadable as a separate document → see the files accompanying the thesis*]

FR: Fichier PDF des diapositives préparées pour le congrès international de l'AIH à Marrakech (Maroc) qui s'est tenu en septembre 2014.

EN: PDF file of the slides prepared for the annual international congress of IAH in Marrakech (Morocco) in September 2014.

Reference:

Laurencelle M, Lefebvre R, Parent M, Ladevèze P, Rivard C, Benoit N & Carrier MA (2014) Modeling the palaeo-hydrogeological evolution of a Canada-U.S. transboundary regional fractured-rock aquifer system following the last deglaciation. *41st IAH International Congress "Groundwater: Challenges and Strategies"*. (Marrakech, Morocco, September 15–19, Oral presentation).

Annexe A0.4: Package of general-purpose R codes (“custom libraries” for R)

[*Downloadable contents (under license) → see the files accompanying the thesis*]

This annexe gathers up the general-purpose R codes that were programmed by the author of the thesis for various purposes, notably to solve the many problems tackled in this doctoral research. Note that many of the general-purpose R codes do include some explanations, information, and examples on how to use or implement the functions they define, but no detailed documentation is provided along with these codes. Instead, it is hoped that the interested reader will be able to easily understand how to use the functions through the many specific-purpose R codes (from Chapter 6, 7 and 8) that “call” these functions, i.e. use them. Yet in the near future, the author of these R codes, Marc Laurencelle, does plan to share most of the R codes he has developed on his public-access GitHub repository (https://github.com/marqisoft), and also to gradually create some more detailed documentation (i.e. “help”) for those R codes. It is therefore strongly recommended to watch Marc’s GitHub repository to obtain future updates (as well as new content).

Note that all source codes made available in the downloadable version of this annexe are licensed under the terms of the MIT license, which reads as follows:

Copyright (c) 2018 Marc Laurencelle

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the "Software"), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included in all copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE SOFTWARE.

Annexe A6.1: Notation for Chapter 6

Abbreviations and Acronyms

K	general abbreviation for local aquifer hydraulic conductivity.
SC	versatile acronym for “specific capacity” (as in SC tests, SC data, …).
T	versatile abbreviation for transmissivity in general (e.g. homogeneous T in an ideal confined aquifer of uniform thickness) or local T around the test well. (note the normal, non-italic font type used for this general-purpose symbol).
T(SC)	versatile abbreviation for “transmissivity (estimate/estimation) from specific-capacity test data”. (note that although similar in meaning to the usual abbreviation “T(Q/s)”, “T(SC)” was preferred, as our definition for “SC data” considers all four SC test parameters plus $s_{\mathrm{w.f}}$, rather than only the two variables directly required for calculating $Q/s_{\mathrm{w.f}}$).
Tb	abbreviation for “Theis-based” used as subscript in some mathematical expressions.
PC	abbreviation for “Papadopulos-Cooper” throughout the text.
PCb	abbreviation for “PC-based” used as subscript in some mathematical expressions.
(±)IND	abbreviation for the “indeterminate” $\log T$ estimate(s); log value from T in $m^2\ s^{-1}$.
NA | N/A	abbreviations both meaning “not applicable”; the former is used to express a blank or empty value (as a data, e.g. in a dataset), while the latter is used in the presentation of some results.
(2D) KDE	technical abbreviation for (two-dimensional) kernel density estimate.
QRR	abbreviation for “quantitatively reliable range”. (note: bounds of the QRR are most often expressed as two $\log T$ values).
$_{\mathrm{lowb}}$ | $_{\mathrm{uppb}}$	subscript used to indicate respectively the lower | upper bound of a range.
QR	abbreviation for “quantitatively reliable”; often used as a Boolean (yes/no).
QS	abbreviation for qualitative similarity, referring to the related categorical data.
TE	abbreviation for theoretically estimable, referring to the related categorical data.
QS:TE	short name for the categorical variable made up from the combination of the TE and the QS categorical data.
TER	acronym for “theoretical estimable range” (for the actual transmissivity). (note: bounds of the TER are most often expressed as two $\log T^*$ values).

Roman symbols (for variables, constants, parameters, and functions)

d_{w}	depth of the well within the tested aquifer (relative to the aquifer top); m.
Q	pumping rate, well discharge (assumed constant through time); $m^3\ s^{-1}$.

S	local storage coefficient (storativity) of the aquifer; –.
s | s_{w}	drawdown: in the aquifer at distance r and time t | in the well at time t; m.
$s_{\mathrm{w.f}}$	final drawdown in the pumped well at the end of the specific capacity test; m.
$s_{\mathrm{w.f.min}}$	minimum measurable (final) drawdown; m.
$s_{\mathrm{w.a}}$	available drawdown in the well at test start, i.e. height of the water column above the pump in the well right before specific capacity test begins; m.
$s_{\mathrm{w.a.min}}$	minimum available drawdown… that is required so that T^* may be estimable; m.
$s_{\mathrm{w.max}}$	theoretical maximum possible drawdown in the pumped well at test end; m.
t	time since the start of the pumping; s.
t_{f}	time t at the end of the specific capacity test; s.
r	radial distance from the center of the well (mostly for the Theis solution); m.
r_{w}	effective radius of the well (e.g. well screen or open hole radius); m.
r_{c}	radius of well casing in the interval over which the water level declines; m. (however, as it is assumed that the well has an uniform radius ($r_{\mathrm{c}} \approx r_{\mathrm{w}}$), r_{w} suffices).
T^*	original / actual / exact T value; $m^2\ s^{-1}$. (note the asterisk).
$T^*_{(<\|\approx\|>)}$	inferred indication(s) regarding actual T^*: below | around | above the value; $m^2\ s^{-1}$.
T^*_{c1} | T^*_{c2}	threshold T^* respectively for the c1 | c2 conditions… (from Equation 14b); $m^2\ s^{-1}$.
T	estimated T value, obtained from inversion of input SC data; $m^2\ s^{-1}$. (note the absence of any superscript asterisk, contrary to T^*, plus the italic font type used to discriminate this symbol from the general-purpose T symbol).
T/T^*	ratio comparing estimated against original / actual / exact T value(s); –.
T^*_{me}	minimum estimable actual-transmissivity threshold, theoretical relationship (defined by Equation 20 in Section 3.8), or calculated value, which depends firstly on the available drawdown in the well at test start ($s_{\mathrm{w.a}}$); $m^2\ s^{-1}$.
T^*_{mxe}	maximum estimable actual-transmissivity threshold, theoretical relationship (defined by Equation 21 in Section 3.8), or calculated value, which depends firstly on the minimum measurable final drawdown in the pumped well ($s_{\mathrm{w.f.min}}$); $m^2\ s^{-1}$.
ln | log	natural logarithm (base *e*) | common logarithm (base 10); *mathematical functions*. (note: logarithm of a physical quantity is evaluated as the logarithm of the numerical value disengaged from its dimension; for instance with $T = 10^{-4}\ m^2/s$, log T = log[$10^{-4}\ m^2\ s^{-1}$ / ($m^2\ s^{-1}$)] ≡ log(10^{-4}) = -4; Matta *et al.* (2010)).
$W(\,)$	well function for the Theis solution; dimensionless output: –.
$F(\,)$	well function for the Papadopulos-Cooper solution; dimensionless output: –.
u ($\equiv u_{\mathrm{w}}$)	main parameter of the two well functions (as defined in Equations 7a and 10); –.

c1 | c2	conditions of similarity between Theis and Papadopulos-Cooper solutions…
$z_{(\dots)}$	depth of (…) relative to the local top of the tested aquifer; m; notably: z_{ground}: ground surface; z_{stat}: static water level; z_{dyn}: dynamic water level; z_{pump}: pump inlet; z_{wbot}: bottom of the well.
X , Y	general symbols to denote the variable which is used for plotting as horizontal and vertical coordinate, or the corresponding data, respectively.
p_{sa}	computed proportion of sufficiently accurate estimates for some $\log T$; %.
p_{samin}	minimum p_{sa} threshold used to determine the QRR; %.
$T_{\mathrm{est}}(\dots)$	alternative shorter notation for either of the T(SC) estimation methods.
ws_{cr}	wellbore storage contribution ratio (defined in Section 3.4: Equations 17a and 17b).
i	general-purpose iterator variable (e.g. in the data processing workflow).
c	series of parameter variation coefficients used in the sensitivity analysis.

Other, non-Roman symbols

*(superscript)	frequently used superscript meaning “actual”, “reference”, “original” …
‘<’, ‘≈’, ‘>’	symbolic names (and labels) for the three reliability zones of qualitative similarity, respectively below, within, and above, the QRR; and similarly, labels for the mixed quantitative and qualitative inferences about the actual transmissivity (T^*).
Ø	symbol for null range (i.e. empty interval).
α	second parameter of PC well function (defined in Equation 10; ≡ S in this study); –.
Δz_{pump}	vertical distance of the pump used during the SC test from the bottom of the well; m.
Δ_{err} | δ_{err}	absolute | relative deviation “deltas” used in the random error generation process within the Monte Carlo approach of the uncertainty analysis (as defined in Table 8).

Annexe A6.2: Sample of the output T(SC) dataset produced in the case study

Table 1 presents a small sample of the generated output data. This data table was prepared by first joining the output T(SC) datasets prepared for each of the two estimation methods, and then randomly selecting a small sample of four data rows to represent each different combination of TE and QS classes (using PC-based results for the latter). Table 1 gives a good overview of how the output data actually differ depending on the consistency and reliability levels of the input SC data. The full output T(SC) dataset that is provided in Annexe A6.5 may also be consulted, to explore the output data more thoroughly.

Here are a few observations made from the sample output data presented in Table 1.

First, the $\log Q/s_{\mathrm{w.f}}$ values appear relatively close to the estimated $\log T$ values. Actually, calculations made in parallel for the whole output dataset confirmed that a high proportion of the $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ values indeed sit within a factor of two around their related T estimates; that proportion is near 90 % for the Theis-based results, and near 70 % for the PC-based results. At first sight, this observation seems to suggest that transmissivity may be approximately inferred directly from specific capacity. However, this is a misleading impression, since the similarity here confirmed concerns the *estimated* T, not the actual T^*. Therefore, although the $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ values may indeed be used to approximate the T values (likely with more success if approximating the Theis-based estimates rather than the PC-based estimates), $Q/s_{\mathrm{w.f}}$ is absolutely not a sufficient information for inferring the *actual* T^* values.

Second, the widths of the QRR's are rather limited. Median values for the QRR bounds are [-5.2, -3.1] for the Theis-based results, and [-5.6, -3.1] for the PC-based results. There are thus only about 2.5 orders of magnitudes, in average, inside which the $\log T$ may potentially be confirmed as quantitatively reliable (QR), i.e. inside which the probability that $\log T^* \approx \log T$ is high. Actually, the PC-based $\log T$ estimates flagged as QR span from -5.4 to -2.6 (1% – 99% percentiles) in the whole output T(SC) dataset.

A third and last observation is that the $\log T^*_{\mathrm{me}}$ values vary substantially from one SC test to another. In the whole output T(SC) dataset, the finite $\log T_{\mathrm{me}}$ values span from -6.9 to -3.5 (1% – 99% percentiles), and ~17 % of the $\log T^*_{\mathrm{me}}$ values are $-\infty$. However, these tests with $\log T^*_{\mathrm{me}} = -\infty$ are not necessarily categorized as '$\in$ TER' since that decision is based on the $s_{\mathrm{w.f}}$ and $s_{\mathrm{w.a}}$ data rather than on the $\log T^*_{\mathrm{me}}$ data, as explained in Section 6.1.2 of Chapter 6.

Table 1: Sample of the output T(SC) dataset produced through application of the data processing workflow of Section 6.1.2 of Chapter 6 for the case study.

	Common output fields							Theis-based specific output fields					PC-based specific output fields				
#	$s_{\mathrm{w.f}}$	$s_{\mathrm{w.a}}$	$\log(Q/s_{\mathrm{w.f}})$	$\log T^*_{\mathrm{me}}$	TE	$T_{\mathrm{Tb}}/T_{\mathrm{PCb}}$	ws_{cr}	$\log T$	QRR	QS	QS:TE	QR	$\log T$	QRR	QS	QS:TE	QR
10952	34.44	33.40	-5.95	-∞	< TER	+∞	2.276	-6.30	[-5.47, -4.34]	< QRR	1	no	-IND	[-5.87, -4.37]	< QRR	1	no
359	46.03	45.06	-5.27	-6.63	< TER	18.128	0.933	-5.54	[-5.22, -3.46]	< QRR	1	no	-6.8	[-5.54, -3.48]	< QRR	1	no
12886	71.63	70.63	-6.27	-∞	< TER	+∞	9.468	-6.79	[-5.21, -4.38]	< QRR	1	no	-IND	[-5.53, -4.39]	< QRR	1	no
16812	103.3	102.35	-5.74	-∞	< TER	+∞	2.766	-6.18	[-5.23, -3.61]	< QRR	1	no	-IND	[-5.57, -3.67]	< QRR	1	no
13284	59.48	70.98	-6.51	-∞	∈ TER	+∞	16.439	-7.13	[-5.22, -4.78]	< QRR	2	no	-IND	[-5.50, -4.77]	< QRR	2	no
13123	103.4	105.40	-5.26	-7.03	∈ TER	17.895	0.925	-5.59	[-5.23, -3.10]	< QRR	2	no	-6.84	[-5.62, -3.10]	< QRR	2	no
4277	20.73	23.08	-5.21	-5.91	∈ TER	1.883	0.568	-5.50	[-5.41, -3.79]	< QRR	2	no	-5.77	[-5.70, -3.78]	< QRR	2	no
17637	45.74	56.96	-5.08	-∞	∈ TER	+∞	1.224	-5.38	[-4.86, -3.30]	< QRR	2	no	-IND	[-5.21, -3.28]	< QRR	2	no
4631	27.43	26.45	-5.04	-5.49	< TER	1.764	0.556	-5.28	[-5.22, -3.46]	< QRR	3	no	-5.52	[-5.54, -3.48]	∈ QRR	3	no
13914	39.65	40.15	-4.42	-4.63	< TER	1.048	0.133	-4.61	[-5.23, -2.58]	∈ QRR	3	no	-4.63	[-5.57, -2.58]	∈ QRR	3	no
2216	21.33	20.35	-4.75	-4.90	< TER	1.049	0.143	-4.90	[-5.47, -3.19]	∈ QRR	3	no	-4.92	[-5.86, -3.19]	∈ QRR	3	no
11350	14.94	14.90	-3.60	-3.65	< TER	1.004	0.020	-3.65	[-5.22, -2.03]	∈ QRR	3	no	-3.65	[-5.55, -2.02]	∈ QRR	3	no
12567	17.39	20.39	-4.24	-4.39	∈ TER	1.007	0.029	-4.31	[-5.65, -2.73]	∈ QRR	4	yes	-4.31	[-6.07, -2.73]	∈ QRR	4	yes
7726	3.96	24.64	-2.64	-3.30	∈ TER	1.000	<0.001	-2.46	[-IND, +IND]	∈ QRR	4	yes	-2.46	[-IND, +IND]	∈ QRR	4	yes
2530	13.71	17.85	-4.66	-5.03	∈ TER	1.106	0.229	-4.83	[-5.21, -3.36]	∈ QRR	4	yes	-4.88	[-5.53, -3.36]	∈ QRR	4	yes
5313	10.36	12.97	-4.52	-4.57	∈ TER	1.013	0.075	-4.46	[-5.42, -3.16]	∈ QRR	4	yes	-4.46	[-5.58, -3.16]	∈ QRR	4	yes
7027	0.30	0.19	-2.64	-2.28	< TER	1.000	<0.001	-2.49	[-7.04, -2.77]	> QRR	5	no	-2.49	[-7.12, -2.79]	> QRR	5	no
5381	0.31	3.89	-2.68	-3.77	∈ TER	1.000	<0.001	-2.59	[-6.12, -2.90]	> QRR	6	no	-2.59	[-6.21, -2.90]	> QRR	6	no
7584	0.30	6.58	-2.90	-4.19	∈ TER	1.000	<0.001	-2.76	[-7.16, -3.11]	> QRR	6	no	-2.76	[-7.85, -3.10]	> QRR	6	no
3537	0.61	13.63	-3.60	-4.88	∈ TER	1.000	0.002	-3.44	[-6.02, -3.45]	> QRR	6	no	-3.44	[-6.22, -3.46]	> QRR	6	no
12164	0.56	6.06	-3.27	-4.30	∈ TER	1.000	<0.001	-3.18	[-6.85, -3.24]	> QRR	6	no	-3.18	[-6.86, -3.25]	> QRR	6	no
16484	86.89	85.88	-6.54	-∞	< TER	+∞	34.759	-7.40	Ø	?	7	no	-IND	Ø	?	7	no
12424	64.00	63.00	-6.98	-∞	< TER	+∞	48.644	-8.01	Ø	?	7	no	-IND	Ø	?	7	no
18039	100.6	99.65	-6.60	-∞	< TER	+∞	40.247	-7.60	Ø	?	7	no	-IND	Ø	?	7	no
219	48.47	47.50	-6.76	-∞	< TER	+∞	29.472	-7.55	Ø	?	7	no	-IND	Ø	?	7	no
6354	18.29	20.02	-6.34	-∞	∈ TER	+∞	11.121	-6.89	Ø	?	8	no	-IND	Ø	?	8	no
18252	1.53	104.23	-6.36	-∞	∈ TER	+∞	11.629	-6.91	Ø	?	8	no	-IND	Ø	?	8	no
16114	9.15	38.66	-6.16	-∞	∈ TER	+∞	24.402	-6.88	Ø	?	8	no	-IND	Ø	?	8	no
17994	85.37	90.41	-6.65	-∞	∈ TER	+∞	38.261	-7.59	Ø	?	8	no	-IND	Ø	?	8	no

Explanations for the column labels: # = row number from the full output T(SC) dataset; TE = "Is the actual T^* likely within the theoretical estimable range (TER) for T^*, and hence is the estimated T potentially quantitatively reliable, or is it below that TER?"; QRR = $\log T$ bounds of the quantitatively reliable range (or else Ø); QS = class of qualitative similarity; QS:TE = class of reliability (class numbers as specified in Table 13) (used for sorting the rows of this table); QR = "Is the estimated T confirmed as effectively quantitatively reliable?". Explanations for the special symbols in the table content: Ø = null range (empty interval); ? = label of the special QS class for tests having a null QRR (= Ø). For further clarification on the notation, please refer to Annexe A6.1.

Annexe A6.3: Sensitivity of the quantitatively reliable range (QRR) to the reference values and error magnitudes used to prepare the “noisy” synthetic specific-capacity (SC) data set

[*Downloadable as a separate document → see the files accompanying the thesis*]

This annexe presents the results from a parametric study that was carried out to evaluate the impact of varying parameters controlling the random error generation process in the Monte-Carlo based uncertainty analysis of Section 5.1 of Chapter 6, on the bounds of the computed “quantitatively reliable range” (QRR). The aim of this parametric study was to provide more general results regarding the sensitivity of the QRR.

Annexe A6.4: Package of R codes

[*Downloadable contents (under license) → see the files accompanying the thesis*]

This annexe gathers up the various program codes that were developed in the R language to solve the many problems tackled in Chapter 6. Although most R scripts already include many explanations, information, and instructions on how to run the code (in whole or in part) in order to reproduce the results from Chapter 6 (including those of its annexes, and the output data in Annexe A6.5), a succinct documentation is also made available (downloadable) along with the source codes. That text document provides the reader with task-oriented workflows that are overall easy to implement.

(See also Annexe A0.4, which gathers up general-purpose R codes that are required as well.)

(Watch the author's GitHub repository at https://github.com/marqisoft to obtain future updates.)

Note that all source codes made available in the downloadable version of this annexe are licensed under the terms of the MIT license, which reads as follows:

Copyright (c) 2018 Marc Laurencelle

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the "Software"), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included in all copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE SOFTWARE.

Annexe A6.5: Datasets related to the case study

[*Downloadable contents → see the files accompanying the thesis*]

This annexe gathers up the main input and output data files that were prepared during the study presented in Chapter 6. The main data files are generally accompanied by metadata that help to understand the nature of the data (variable name, brief description, units, …). A "Read me" file in PDF format is also included, which summarizes the contents of the annexe's folder and provides instructions on how the data files may be used, especially to reproduce results of Chapter 6 (including its annexes).

More specifically, this annexe primarily includes:

- an input specific capacity (SC) dataset;
- an output dataset containing T(SC) estimates (Theis- and Papadopulos-Cooper-based);
- a binary file of a R session workspace saved right after batch computation of mixed quantitative and qualitative indications about actual transmissivity (T), for each of the two T(SC) estimation methods.

The input SC dataset was prepared firstly by extracting data from the "SIH" public water well database managed by Quebec Ministry of the Environment ("*Système d'information hydrogéologique*": http://www.mddep.gouv.qc.ca/eau/souterraines/sih/index.htm), a database that is regularly updated as new wells are reported to the provincial government. The water-well data provided in this annexe, however, were last extracted from the SIH in 2013. Moreover, the extracted data were then processed in several respects (e.g., to correct clearly incorrect values, to join useful additional data to the water-well data, …). This data processing, may have produced erroneous results in some cases.

Considering the above, the author cannot accept any liability nor gives any guarantee that the data and related information in this annexe are accurate, complete and up-to-date.

Finally, the author invites anyone using datasets from this annexe to cite the thesis.

Annexe A7.1: The Upper Truncated Shifted Pareto distribution

The upper truncated shifted Pareto (UTSPareto) distribution, also called truncated shifted Pareto (TSP) by other authors (Houghton, 1988), stems from the original *J*-shape Pareto distribution (Johnson *et al.*, 1994). It is a direct variant of the (upper) truncated Pareto (UTP) distribution (Zaninetti & Ferraro, 2008),

$$f_X(x|\alpha, L, U) = \frac{\alpha L^{\alpha} \cdot x^{-(\alpha+1)}}{1-(L/U)^{\alpha}}, L < x \leq U, \alpha > 0,$$

its distribution function being :

$$F_X(x) = \frac{1-\left(\frac{L}{x}\right)^{\alpha}}{1-\left(\frac{L}{U}\right)^{\alpha}}$$

The global form of the distribution is determined by shape parameter α. A simple rightward shift of the variable, noted $x_0 > 0$, brings about the so called UTSPareto shifted distribution for variable X_s (through $X_s = X + x_0$), the location parameters (L, U) and support domain being modified likewise. The authors cited above document the various properties (v.g. moments) of the distribution.

Table 17 (in Section 4.2 of Chapter 7) presents the Pareto parameter values retained for the heterogeneity variable $H_{\mathrm{bf.f}}$ in our optimized model: L = 0.001, U = 20, α = 1.7, x_0 = 0.846.

Annexe A7.2: Special reference terms for the drilling submodel

This annexe briefly presents how the two special reference terms from Table 16, $\Delta d^{*}_{\mathrm{dwmax}}$ and $T^{**}_{\mathrm{w.target}}$, where designed in our implementation of the methodology to the case study. Yet, it is recommended to have a look at the R program codes provided in Annexe A7.7 in order to get a more complete and precise picture of the algorithms involved.

The first special reference term, $\Delta d^{*}_{\mathrm{dwmax}}(d_{\mathrm{w.min}})$, is an arbritrary function that was developed to calculate a $d_{\mathrm{w.max}}$ value from a $d_{\mathrm{w.min}}$ value so that calculated $d^{i}_{\mathrm{w.max}} > d^{i}_{\mathrm{w.min}}$ in every case (Equation 1 below). The vertical distance $d^{i}_{\mathrm{w.max}} - d^{i}_{\mathrm{w.min}} = \Delta d^{i}_{\mathrm{dwmax}}$ keeps significant whatever the $d^{i}_{\mathrm{w.min}}$ value, to model the concept that a well driller most certainly does fix the maximum depth at which to stop the drilling (whatever the drill hole productivity) much deeper than the minimum depth judged necessary to obtain an exploitable water well. Thus, although the mathematical definition of the $\Delta d^{*}_{\mathrm{dwmax}}(d_{\mathrm{w.min}})$ function is arbitrary, it is deemed a reasonably plausible model of the two related drillers' criteria C1 and C3 defined in Section 2.3 of Chapter 7. The specific values to set up this arbitrary formula were chosen empirically, through trial and error. Structure of the formula itself was adjusted during the early development and optimization of this $\Delta d^{*}_{\mathrm{dwmax}}(d_{\mathrm{w.min}})$ special reference term. The finally chosen form for the term is:

$$\Delta d^{*}_{\mathrm{dwmax}}\left(d^{i}_{\mathrm{w.min}}, H^{i}_{\mathrm{coef}}\right) = \Delta_{\mathrm{min}} + \left[p_{\mathrm{mult}} * \left(\frac{p_{\mathrm{num}}}{d^{i}_{\mathrm{w.min}} + p_{\mathrm{add}}}\right)^{p_{\mathrm{exp}}}\right] \cdot H^{i}_{\mathrm{coef}} \qquad (1)$$

where $d_{\mathrm{w.min}}$ is the heterogeneous minimum well depth criterion value for the i^{th} virtual well, Δ_{min} is the imposed minimum vertical distance [m], p_{num} and p_{add} are metric parameters [m], p_{exp} is a dimensionless parameter controlling the rate of the decrease of $\Delta d^{*}_{\mathrm{dwmax}}$ with increased $d_{\mathrm{w.min}}$, p_{mult} is a generic coefficient used to scale the term to its right, and $H^{i}_{\mathrm{coef}} > 0$ is the heterogeneity term which scales the result calculated from the brackets with a random value.

The finally chosen values for the formula's parameters are reported in Table 17 (in Chapter 7). These values were judged equally suitable for all three geological zones. A few examples of reference values calculated using our specific implementation of the $\Delta d^{*}_{\mathrm{dwmax}}(d_{\mathrm{w.min}})$ reference term with no included heterogeneity (i.e. $H^{i}_{\mathrm{coef}} = 0$) are provided in Table 1 further below.

Differently, the second reference term, $T^{**}_{\mathrm{w.target}}(s_{\mathrm{w.a}})$, has a less arbitrary definition. It is based on the rationale that the "typical" (i.e. conceptualized) well driller likely tends to predetermine the minimum target for drill hole transmissivity (i.e. the drillers' criterion C2 as defined in Section 2.3 of Chapter 7) based on the projected available drawdown for the well once completed ($s_{\mathrm{w.a}}$). It is deemed reasonable to relate the reference minimum threshold value ($T^{**}_{\mathrm{w.target}}$) with $s_{\mathrm{w.a}}$ as it is general practice to optimize the setup of the residential water well so that the dynamic water level within the well maintains a fair distance above the pump at all times (especially in the hours of high water demand). This translates into an equivalent condition that drawdown within the well remains smaller than some fraction f of the available drawdown (static conditions), i.e.: $s_{\mathrm{w}}(t) < f * s_{\mathrm{w.a}}$. In our implementation, an arbitrary value of f = 0.5 was chosen.

Now, although the actual well driller most likely follows pre-established standard procedures to determine the productivity target (e.g. in terms of measured specific capacity Q/s_{f}) based on several environmental and economical factors related to each particular drilling operation, it is assumed here that this productivity target can be imitated reasonably well using a more physical approach. An algorithm was thus developed that uses the analytical solution from Papadopulos & Cooper (1967) to calculate the transient drawdown within a notional water well of typical radius (r_{w} = 3 in = 0.0762 m) and typical surrounding aquifer storativity (S = 1×10^{-5}) caused by a pumping sequence involving several periods of contrasting pumping rates reflecting the typical daily groundwater demand of a private residence: $s_{\mathrm{w}}(t, \dots)_{\mathrm{PCb}}$. The Papadopulos-Cooper solution here has the valuable advantage that it considers the wellbore storage effect (see Chapter 6 for more information). This "forward solution" is thus used to detect the peak drawdown in the well during the day ($s_{\mathrm{w.peak}}$), for a given scenario (sequence) of pumping rates. The "inverse problem", then, consists in finding, through optimization, the transmissivity (T^{*}_{opt}) that best approaches the maximum acceptable drawdown in the well ($s_{\mathrm{w.ma}}$), so that $s_{\mathrm{w}}\left(t, T = T^{*}_{\mathrm{opt}}, \dots\right)_{\mathrm{PCb}} \rightarrow s_{\mathrm{w.ma}} \stackrel{\mathrm{def}}{=} f * s_{\mathrm{w.a}}$. Finally, the pair of values, T^{*}_{opt} and $s_{\mathrm{w.a}}$, are stored.

In order to prepare the full model for $T^{**}_{\mathrm{w.target}}(s_{\mathrm{w.a}})$, a script was programmed that simply applies the inverse problem over a large series of values of $s_{\mathrm{w.a}} > 0$ m, to get as many T^{*}_{opt} predictions. The model is finally defined through simple linear interpolation of the obtained $\log T^{*}_{\mathrm{opt}}$ values along the $s_{\mathrm{w.a}}$ "axis". In sum, $T^{**}_{\mathrm{w.target}}(s_{\mathrm{w.a}})$ is defined numerically rather than mathematically. A few examples of reference values obtained using this script, still with no included heterogeneity (i.e. $H^{i}_{\mathrm{coef}} = 0$), are provided in Table 2 further below.

For a more detailed picture of the algorithm, notably on the meaning of the "daily water usage" parameters mentioned in Table 17 in Chapter 7, please refer to the R program codes (especially the "R.SPUMP" code) provided in Annexe A7.7.

Table 1: Example of a few calculated reference values for the maximum drill hole depth in rock ($d_{w.max}$) stochastic parameter, prior to adding heterogeneity.

$d_{w.min}$ [m]	Δd^{*}_{dwmax} [m]	$d_{w.max}$ [m]
0.0	61.7	61.7
10.0	41.4	51.4
25.0	30.2	55.2
50.0	22.4	72.4
100.0	16.2	116.2

Table 2: Example of a few calculated reference values for the minimum target for well transmissivity ($T^{*}_{w.target}$) stochastic parameter, prior to adding heterogeneity. A value of f = 0.5 is used to derive the maximum acceptable drawdown ($s_{w.ma}$) from the available drawdown ($s_{w.a}$).

$s_{w.a}$ [m]	$T^{**}_{w.target}$ [m^2/s]
10.0	5.32×10^{-5}
25.0	1.86×10^{-5}
50.0	6.24×10^{-6}
60.0	5.58×10^{-6}
70.0	5.58×10^{-6}

Annexe A7.3: Statistics and quantitative indicators of goodness of fit considered for calibration of the stochastic model

[*Downloadable as a separate document → see the files accompanying the thesis*]

This annexe presents the statistics and derived quantitative indicators that are automatically computed after the stochastic model described in Section 3.2 of Chapter 7 has finished running, mainly for the purpose of manual calibration of the model. Visual inspection of these graphs helps to assess if simulated results are representative of observed data.

Annexe A7.4: Sensitivity of the stochastic model to its numeric sub-parameters

[*Downloadable as a separate document → see the files accompanying the thesis*]

This annexe presents the results of a parametric study that was carried out to assess the sensitivity of the stochastic model described in Section 3.2 of Chapter 7 to most of its numeric sub-parameters. These indicator-based results notably provide an assessment of the goodness of fit of the calibrated stochastic model (for the St. Lawrence Platform zone of the study area).

Annexe A7.5: Main results obtained from the calibrated stochastic model after switching to the alternative ‘unbiased’ drilling mode

[*Downloadable as a separate document → see the files accompanying the thesis*]

This annexe presents the results that were obtained from the calibrated stochastic model after switching off the Boolean parameter ‘DM’ (“drilling mode”) of the stochastic model described in Section 3.2 of Chapter 7, for each of the three geological zones of the study area.

Annexe A7.6: Full set of graphical results from the Boolean parametric study

[*Downloadable as a separate document → see the files accompanying the thesis*]

This annexe presents the Full set of graphical results from the parametric study documented in Section 4.3.2 of Chapter 7, which focused on four Boolean parameters (on/off switches) of the stochastic model described in Section 3.2 of the same chapter. This parametric study was carried out to assess the respective role of key components of the stochastic model. The studied Boolean parameters, also listed in Table 18 of Chapter 7, are: 1) the drilling mode (DM), 2) the heterogeneity of fracture apertures ($b_{\mathrm{f}}.\mathrm{hetero}$), 3) the depth-dependence of fracture density ($\mathrm{fd}.\mathrm{zdep}$), and 4) the depth-dependence of fracture apertures ($b_{\mathrm{f}}.\mathrm{zdep}$). Note that this annexe repeats the graphical results presented in Section 4.3.2 of Chapter 7, while also providing several additional results. Further note that all results presented in this annexe originate from the calibrated stochastic model for the St. Lawrence Platform zone of the study area.

Annexe A7.7: Package of R codes

[*Downloadable contents (under license) → see the files accompanying the thesis*]

This annexe gathers up the various program codes that were developed in the R language to solve the many problems tackled in Chapter 7. Although most R scripts already include many explanations, information, and instructions on how to run the code (in whole or in part) in order to reproduce the results from Chapter 7 (including those of its annexes, and the output data in Annexe A7.8), a succinct documentation is also made available (downloadable) along with the source codes. That text document provides the reader with task-oriented workflows that are overall easy to implement.

(See also Annexe A0.4, which gathers up general-purpose R codes that are required as well.)

(Watch the author's GitHub repository at https://github.com/marqisoft to obtain future updates.)

Note that all source codes made available in the downloadable version of this annexe are licensed under the terms of the MIT license, which reads as follows:

Copyright (c) 2018 Marc Laurencelle

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the "Software"), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included in all copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE SOFTWARE.

Annexe A7.8: Datasets related to the case study

[*Downloadable contents → see the files accompanying the thesis*]

This annexe gathers up the input data files that are required to run the R program codes related to the stochastic model described in Chapter 7 (see Annexe A7.7, about the R codes). The data files are generally accompanied by metadata that help to understand the nature of the data (variable name, brief description, units, …). A "Read me" file in PDF format is also included, which summarizes the contents of the annexe's folder and provides instructions on how the data files may be used, especially to reproduce results of Chapter 7 (including its annexes).

More specifically, this annexe primarily includes:

- an exact copy of the output T(SC) estimates dataset from Annexe A6.5, which how acts as an input dataset when applying the stochastic modeling workflow of Chapter 7, and is essentially used to compute "observed" well density per depth interval → first type of calibration target data;
- input data giving the truncated probability density functions (PDF's) or empirical quantile functions (EQF's) —as defined in Section 3.1 of Chapter 7— per depth interval, for each zone of the study area, which are interpreted as quantitatively-reliable "observed" statistics about well transmissivity (T_{w}) → second type of calibration target data;
- input data providing statistics about the local thickness of the unconsolidated sediments overlying the rock aquifer (Δz_{sed}), and the local depth of the static water level relative to the ground (Δz_{stat}), for each zone of the study area;
- input data table gathering the computed fracture density values as a function of depth in rock that were used to prepare Figure 34 of Chapter 7 and thus to set up the fractured-rock generation submodel;
- output datasets gathering statistics summarizing the results obtained from the calibrated stochastic model after switching to the alternative "unbiased" drilling mode, for each of the three zones;
- an input file providing the data needed to implement the "conventional approach" in parallel to the proposed new approach for K(z) inference, mostly for comparison purposes (see, e.g., Figure 35d).

The author invites anyone using datasets from this annexe to cite the thesis.

Annexe A8.1 : Description mathématique du modèle de sédimentation-consolidation adapté de Wangen (1992)

[*Document téléchargeable → voir les fichiers accompagnant la thèse*]

Cette annexe présente le modèle mathématique utilisé dans le Chapitre 8 de la thèse pour simuler numériquement le processus de sédimentation-consolidation (S&C) de l'aquitard argileux pendant sa formation. Ce modèle mathématique est en fait une version modifiée du modèle mathématique de Wangen (1992). Plus précisément, y sont présentés, par sections :

1. les systèmes de coordonnées utilisés pour aborder le problème de S&C ;
2. les constantes, variables et relations empiriques en jeu dans le problème de S&C ;
3. le développement mathématique menant à l'équation différentielle principale à résoudre ;
4. la reformulation de cette dernière sous la forme d'une équation parabolique non linéaire ;
5. l'approche de résolution numérique de cette équation parabolique non linéaire ;
6. l'approche suivie pour le paramétrage du modèle de S&C dans la thèse.

Il est important de souligner que les contenus de cette annexe reproduisent en grande partie ceux de l'article de référence (Wangen, 1992), mais présentent néanmoins une nouveauté importante : l'équation différentielle issue de notre développement mathématique permet de considérer un taux de sédimentation variable dans le temps (incluant le cas particulier d'un taux de sédimentation temporairement nul), ce que ne permet pas l'équation différentielle d'origine. De plus, notre développement mathématique est plus complet et détaillé que celui publié dans l'article de référence, ce qui facilite sa compréhension.

Annexe A8.2 : Animations vidéos des résultats des simulations 2D de la Partie D

Note: This "overview page" of Annexe A8.2 contains texts in French (FR) and in English (EN).

[FR: *Contenus téléchargeables → voir les fichiers accompagnant la thèse*]

[EN: *Downloadable contents → see the files accompanying the thesis*]

FR : Cette annexe rassemble les animations vidéos qui ont été préparées à partir des fichiers de résultats simulés préalablement par FEFLOW, pour chacun des quatre modèles 2Dxz présentés dans la Section 5.D du Chapitre 8, à savoir pour :

- le modèle D1 : salinité marine de 35 g/L et décroissance « normale » de K(z) ;
- le modèle D2 : salinité marine de 35 g/L et décroissance « ralentie » de K(z) ;
- le modèle D1′ : salinité marine de 24 g/L et décroissance « normale » de K(z) ;
- le modèle D1″ : salinité marine de 12 g/L et décroissance « normale » de K(z).

Le lecteur est invité à regarder préalablement (ou simultanément) la Figure 53a, afin qu'il puisse comprendre un peu mieux ces résultats animés malgré le peu de repères visuels.

EN: This annexe gathers up the video files that were prepared from the FEFLOW full simulation record (".DAC") files of all four 2Dxz models that are presented in Section 5.D of Chapter 8:

- model D1 : seawater salinity of 35 g/L and "normal" decrease of K(z) ;
- model D2 : seawater salinity of 35 g/L and "slower" decrease of K(z) ;
- model D1′ : seawater salinity of 24 g/L and "normal" decrease of K(z) ;
- model D1″ : seawater salinity of 12 g/L and "normal" decrease of K(z).

The reader is invited to have a look at Figure 53a prior to (or while) watching the videos, so that he can have a better understanding of the animated results despite the lack of visual cues.

Annexe A8.3 : Codes sources des scripts en langage R et des plugins en C++

Note: This "overview page" of Annexe A8.3 contains texts in French (FR) and in English (EN).

[FR: *Contenus téléchargeables (sous licence) → voir les fichiers accompagnant la thèse*]

[EN: *Downloadable contents (under license) → see the files accompanying the thesis*]

FR : Cette annexe rassemble les nombreux programmes informatiques en langage R (aussi appelés « scripts R »), ainsi que les *plugins* « IFM » (de l'anglais "FEFLOW Interface Manager") dénommés « PaleoSea1D » et « PaleoSea2D » (codes sources C++, et *plugins* compilés en fichiers DLL), qui ont été développés pour mener à bien ces travaux. Bien qu'une majorité des scripts R contiennent déjà de nombreuses explications, informations et instructions relatives à l'exécution du code dans l'optique de reproduire les résultats du Chapitre 8 (incluant ceux de ses annexes ainsi que les données de sortie rassemblées dans l'Annexe A8.4), une documentation technique succincte est également mise à disposition (téléchargeable). Celle-ci présente les séquences d'instructions à suivre pour reproduire les résultats du Chapitre 8 et, de façon plus générale, pour comprendre le fonctionnement global de ces divers outils. En outre, le lecteur intéressé pourra essayer d'appliquer ces outils à d'autres régions d'étude où une problématique paléo-hydrogéologique similaire a été identifiée, voire adapter le code source de certains d'entre eux, afin d'aborder le problème sous un angle différent.

(Voir aussi l'Annexe A0.4, qui rassemble les codes R d'utilité générale, dont plusieurs sont nécessaires à l'exécution des codes R spécifiques au Chapitre 8.)

(Visiter régulièrement https://github.com/marqisoft pour être informé des mises à jour et ajouts de codes sources programmés par l'auteur de la thèse.)

Tous les codes sources et logiciels compilés contenus dans la version téléchargeable de cette annexe sont mis à disposition du public sous les termes de la licence MIT, qui se lit comme suit (**voir le texte de licence, en anglais, en page suivante**).

EN: This annexe gathers up the various program codes in the R language (also called "R scripts"), as well as the "IFM" (from "FEFLOW Interface Manager") plugins named "PaleoSea1D" and "PaleoSea2D" (C++ sources codes, and the plugins compiled as DLL files), that were developed to solve the many problems tackled in Chapter 8. Although most R scripts already include many

explanations, information, and instructions on how to run the code (in whole or in part) in order to reproduce the results from Chapter 8 (including those of its annexes, and the output data in Annexe A8.4), a succinct documentation is also made available (downloadable) along with the source codes. That documentation provides the reader with task-oriented workflows that are overall easy to implement and, more generally, helps to understand the functioning of these various tools.

(See also Annexe A0.4, which gathers up general-purpose R codes that are required as well.)

(Watch the author's GitHub repository at https://github.com/marqisoft to obtain future updates.)

Note that all source codes made available in the downloadable version of this annexe are licensed under the terms of the MIT license, which reads as follows (**see license text below**).

Ci-dessous : la licence MIT s'appliquant à tous les contenus téléchargeables de l'Annexe A8.3 :

Right below: the MIT license applying to all downloadable contents of Annexe A8.3:

Copyright (c) 2018 Marc Laurencelle

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the "Software"), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included in all copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS", WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE SOFTWARE.

Annexe A8.4 : Données et modèles numériques liés à l'étude de cas

Note: This "overview page" of Annexe A8.4 contains texts in French (FR) and in English (EN).

[FR: *Contenus téléchargeables → voir les fichiers accompagnant la thèse*]

[EN: *Downloadable contents → see the files accompanying the thesis*]

FR : Cette annexe rassemble les fichiers d'entrée et de sortie principaux ayant été préparés lors de l'étude présentée dans le Chapitre 8. Certains des fichiers de données sont accompagnés de métadonnées permettant de saisir plus rapidement et facilement la nature des données (noms des variables, brève description, unités, …). Un fichier « Lisez-moi » au format PDF est également fourni, lequel documente le contenu du dossier de fichiers de l'annexe et explique comment ces fichiers de données peuvent être utilisés, en particulier pour reproduire les résultats du Chapitre 8 (et de sa deuxième annexe). Cette annexe contient principalement :

- des fichiers de problèmes FEFLOW (*.FEM : binaire);
- des fichiers de résultats simulés par FEFLOW (*.DAC : binaire);
- des exports manuels sélectifs de résultats simulés par FEFLOW (essentiellement des données de concentration) (*.DAT : ASCII).

L'auteur invite quiconque utilisant des données ou modèles de cette annexe à citer la thèse.

EN: This annexe gathers up the main input and output data files that were prepared during the study presented in Chapter 8. Some of the data files are accompanied by metadata that help to understand the nature of the data (variable name, brief description, units, …). A "Read me" file in PDF format is also included, which summarizes the contents of the annexe's folder and provides instructions on how the data files may be used, especially to reproduce results of Chapter 8 (including its second annexe).

More specifically, this annexe primarily includes:

- FEFLOW problem files (*.FEM);
- FEFLOW full simulation record files (*.DAC);
- manual exports of FEFLOW simulation results (mostly concentration data) (*.DAT).

The author invites anyone using data or models from this annexe to cite the thesis.