

INRS

Université d'avant-garde

CENTRE EAU, TERRE ET ENVIRONNEMENT

Caractérisation de l'hétérogénéité de la conductivité hydraulique et simulations du transport de contaminants

Secteur d'essais de RDDC-Valcartier, Québec

Par

MARTIN BLOUIN

Mémoire présenté

dans le cadre du programme de maîtrise en sciences de la terre
pour l'obtention du grade de Maître ès Sciences (M.Sc.)

Jury d'évaluation

Examineur externe

Denis Marcotte, Ph. D.

École polytechnique Montréal

Examineur interne

Réné Therrien, Ph. D.

Université Laval

Codirecteur de recherche

Erwan Gloaguen, Ph.D.

INRS-ETE

Directeur de recherche

Richard Martel, Ph.D.

INRS-ETE

JUIN 2010

Résumé

Les techniques classiques de modélisation hydrogéologique utilisant des approches déterministes pour caractériser les processus d'écoulement de l'eau souterraine et du transport de masse dans l'eau souterraine négligent, par construction, l'effet de l'hétérogénéité géologique et hydraulique. Ainsi, ces méthodes peuvent conduire à une sur ou sous-estimation du transport de contaminants dans les régions sensibles. Dans le but de développer une méthodologie pour la construction de modèles hydrogéologiques dans les systèmes hétérogènes, une méthode de modélisation hydrogéologique par approche géostatistique du secteur d'essais de Recherche et développement pour la défense Canada (RDDC) – Valcartier, Québec a été réalisée. Ce site d'environ 6 km² repose sur un gneiss du Bouclier canadien recouvert de dépôts meubles deltaïques mis en place principalement par la mer de Champlain. Il est utilisé depuis la 2^e guerre mondiale à des fins expérimentales au niveau militaire.

Une modélisation de la géologie basée sur les propriétés hydrogéologiques des matériaux (hydrofaciès ou HF) du secteur d'essais a d'abord été réalisée dans le but d'améliorer la connaissance sur la distribution des faciès contrôlant l'écoulement et le transport de masse. La présence d'une unité silteuse fine a d'abord été délimitée à la main. L'effet de cette unité sur l'écoulement et le transport est considérable et contribue à la présence d'une nappe perchée supérieure dans le secteur nord et nord-ouest du site. La présence de couches de graviers et sables grossiers en profondeur a aussi été visée par la modélisation de la géologie par HF. Ainsi, plusieurs scénarios de distributions des hydrofaciès (HF) sur le site ont été produits à l'aide de simulations multi-points. Les chemins préférentiels d'écoulement et de transport ont ainsi été définis à grande échelle.

Ensuite, utilisant les valeurs de conductivités hydrauliques mesurées sur le site, une distribution spécifique de la conductivité hydraulique a été assignée pour chacun des HF. Différentes distributions de conductivité hydraulique simulées ont alors été attribuées à chacun des HF en utilisant des simulations séquentielles gaussiennes (SGS). La variabilité de la conductivité hydraulique (K) sur le site a ainsi été considérée. Les chemins préférentiels d'écoulement et de transport ont alors été définis à petite échelle.

En tout, 500 modèles 3D de K ont ainsi été générés.

Parmi tous ces modèles, un modèle de K représentatif a été testé et calé avec les charges hydrauliques en simulation d'écoulement souterrain avec le logiciel FEFLOW®. Les limites de Dirichlet et Neumann ont alors été appliquées selon les données disponibles et la reproduction des charges hydrauliques observées par le modèle d'écoulement simulé. Une sélection des scénarios les plus réalistes a alors été effectuée d'après la reproduction des données observées.

Les modèles 3D de K choisis ont finalement servi à produire plusieurs scénarios de transport de contaminants pour une source constante sur une période de 20 ans. L'effet de la variabilité de la distribution des HF et des hétérogénéités sub-HF a pu être observé selon la répartition 3D simulée de la concentration après 20 ans. Les différents résultats issus de ces simulations ont pu être comparés à un modèle de K moyen. Le modèle moyen semble négliger l'effet des chemins préférentiels d'écoulement entraînant une sous-estimation probable du transport de contaminants. Enfin, une brève analyse statistique sur l'ensemble des valeurs finales de concentrations simulées a permis de produire un outil décisionnel utile à la gestion du site.

Abstract

Classical hydrogeological modelling techniques using deterministic approaches to characterize sub-surface processes neglect the effect of the heterogeneity of the groundwater system. Consequently, such methods yield to over or underestimate the mass transport in heterogeneous areas. To assess for heterogeneity of these systems and to provide tools to evaluate uncertainties in aquifer management, geostatistical simulations were used in a detailed hydrogeological modelling for the "secteur d'essais" of Defence, Research and Development Canada (DRDC) – Valcartier, Quebec. The study site is about 6 km² and lies on Canadian Shield gneiss covered with mostly deltaic sands of the Champlain Sea. Since the end of World War II, the site is used for military experimental purposes.

A geological model of the study site was first built regrouping sediment matter by hydrogeological properties (hydrofacies or HF). The aim of this model was to improve knowledge on geological facies controlling the groundwater flow and mass transport. This modelling step revealed the presence of a fine silty unit and exposed scenarios of its distribution. This unit mainly contributes to the presence of a perched water system in the north and north-western part of the site. The presence of gravel and coarse sand at depth has also been highlighted. 3D Hydrofacies (HF) distribution scenarios were produced using multiple-point geostatistics. Hence, groundwater and mass transport preferential flow paths were defined at large scale.

Then, a specific hydraulic conductivity distribution was assigned to each hydrogeological unit (HF) using measured data on site. Sequential Gaussian simulations (SGS) enable hydraulic conductivity (K) heterogeneity reproduction within each HF. The variability of hydraulic conductivity values on the studied site has been considered. Hence, groundwater and mass transport preferential flow paths were defined at a small scale. In total, 500 K models were generated.

Using a calibrated hydraulic conductivity model amongst the 500, groundwater flow simulations were undertaken in a FEFLOW© model. Dirichlet and Neumann boundary

conditions were defined considering available data and model reproduction to observed hydraulic heads. Then a selection process was conducted to choose the most realistic models considering observed data reproduction.

The selected 3D K models were then used to generate multiple mass transport scenarios assuming a constant source over 20 years. The effect of HF distribution variability and of sub-HF heterogeneities can be observed through 3D maps of simulated concentrations after 20 years. The different mass concentration values obtained from mass transport simulations were compared to simulation results for a mean K model. Transport simulations for the mean K model show underestimation of contaminant travel times and amplitudes probably caused by neglecting preferential flow paths effect. Finally, a brief statistical analysis over the simulated concentrations values after 20 years enabled the production of a useful decision making tool for site management.

Remerciements

Ce projet de maîtrise n'aurait pu se réaliser sans la participation de plusieurs individus. Tout d'abord, mon directeur de recherche, Richard Martel a été celui qui m'a donné le goût de poursuivre mon cheminement académique à l'INRS-ETE, une décision que je n'allais pas regretter. Merci Richard de m'avoir témoigné autant de confiance et d'avoir été un si bon modèle professionnel et humain. Il serait impensable de passer sous silence l'implication de mon co-directeur Erwan Gloaguen dans ce projet. Ce dernier a apporté une dimension nouvelle en m'introduisant aux géostatistiques et à la géophysique appliquées à l'hydrogéologie. J'aimerais remercier Lise Lamarche et Daniel Paradis pour m'avoir transmis leur secret sur la géologie et l'hydrogéologie. Leur aide en modélisation a permis une évolution efficace du projet. Les coups de main de Jean-Philippe Drolet, Guillaume Comeau et Clarisse Deschênes-Rancourt ont permis la bonne marche des travaux de terrain, merci à vous. Je voudrais également souligné la collaboration de Marie-Catherine Poulin-Talbot pour le transfert des données du site d'étude. Merci à RDDC-Valcartier et plus particulièrement à Nathalie Roy, pour le financement, l'accès au site et la communication des informations pertinentes au projet.

Les personnes que j'ai pu côtoyé pendant les années de ma maîtrise ce sont révélées être d'une grande aide autant au niveau scientifique que divertissement. Merci à Camille, Catherine, Christine, Guillaume C, Guillaume G., Harold, Lorenzo, Marc-André, Maxime, Max Gre et Nic Francoeur.

Enfin, j'aimerais remercier tout spécialement ma copine, Mélissa. Merci de m'avoir toujours encouragé et poussé à persévérer. Merci à mes parents et à toute ma famille d'être comme ils sont et d'avoir été des exemples dans leur approche de la vie.

*« Le doute n'est pas une condition
agréable, mais la certitude est
absurde. »*

Voltaire

Table des matières

Résumé	iii
Abstract	v
Remerciements	vii
Liste des tableaux	xii
Liste des figures	xiv
Introduction	1
Chapitre 1 : Revue des méthodes de caractérisation de l'hétérogénéité des aquifères	5
1.1 Approches descriptives	6
1.2 Imitations de procédés	6
1.2.1 Reproduction des données hydrogéologiques	6
1.2.2 Reproduction des processus géologiques	6
1.3 Imitation de structure	7
1.3.1 Reproduction du patron de sédimentation	7
1.3.2 Approches géostatistiques	7
1.4 Approche sélectionnée	9
Chapitre 2 : Géologie des formations superficielles du secteur d'essais	11
2.1 Interprétation de la géologie de surface et du quaternaire	11
2.2 Travaux de terrain	13
2.2.1 Levés géophysiques électromagnétiques (radar géologique)	14
2.2.2 Essais de pénétration au cône (CPT)	17
2.3 Travaux antérieurs revus et intégrés	18
2.3.1 Définition des hydrofaciès	19
2.3.2 Intégration de la géologie de surface	20
2.4 Construction du modèle géologique 3-D	20
2.4.1 Coupes stratigraphiques	21
2.4.2 Création de surfaces interpolées	21

2.4.3 Création des volumes des unités stratigraphiques	22
Article 1 :Heterogeneity definition of a deltaic aquifer using multiple-point geostatistics and sequential Gaussian simulations	25
ABSTRACT	25
RÉSUMÉ	25
3.1 Introduction	26
3.1.1 Study area	26
3.1.2 Study objectives	27
3.2 Definition of HF heterogeneity	29
3.2.1 Theory of MPG	29
3.2.2 Methodology	30
3.2.3 HF simulated models	34
3.3 Definition of hydraulic conductivity (K) heterogeneity	36
3.3.1 Theory of Sequential Gaussian Simulations (SGS)	36
3.3.2 Methodology	37
3.3.3 K simulated models	37
Conclusion	41
Acknowledgements	42
Article 2 : A probabilistic approach for mass transport characterization in a heterogeneous aquifer system	43
ABSTRACT	43
RÉSUMÉ	43
4.1 Introduction	44
4.2 Study area description	45
4.2.1 Available data	45
4.2.2 Geological and hydrogeological context	46
4.3 Heterogeneity definition approach	47
4.3.1 HF distribution simulations	49
4.3.2 K distribution simulations	50
4.4 Groundwater flow modelling	51
4.4.1 Model calibration	51
4.4.2 K scenarios discrimination	53
4.4.3 Sensitivity analysis	55
4.4.4 Limitations of the groundwater flow model	56
4.5 Transport modelling	56
4.5.1 Calibration and transport parameters	56
4.5.2 Transport simulated scenarios	57
4.5.3 Comparison to mean K model	58
4.6 Conclusion	61

Conclusion	63
Bibliographie	68
Annexe A : Tableaux et figures complémentaires (Disponible sur DVD)	73
Annexe B : Cartes des concentrations mesurées au secteur d'essais (Disponible sur DVD)	75
Annexe C : Résultats d'interprétation complémentaires et fichiers de modélisation (Disponible sur DVD)	77

Liste des tableaux

2.1	<i>Description sommaire des groupements par hydrofaciès (HF)</i>	19
3.1	<i>Hydrofacies classification definition summary</i>	28
3.2	<i>Summary of variography results for SGS</i>	37
3.3	<i>Summary of HF range for SGS</i>	38
4.1	<i>Hydrofacies classification definition summary</i>	47
4.2	<i>Boundary conditions of the groundwater flow model</i>	53

Liste des figures

2.1	<i>Géologie de surface du secteur d'essais</i>	13
2.2	<i>Position des levés géoradar</i>	15
2.3	<i>Exemple d'interprétation d'un levé géoradar. Données filtrées, levé #2</i>	16
2.4	<i>Localisation des sondages CPT</i>	17
2.5	<i>Résultats du sondage CPT ESS3</i>	18
2.6	<i>Exemple de conversion des données de description de forage en HF</i>	20
2.7	<i>Exemple de coupe stratigraphique Traverse©</i>	22
2.8	<i>Modèle géologique 3-D des formations superficielles</i>	23
2.9	<i>Vue en coupes du modèle géologique 3-D des formations superficielles</i>	23
3.1	<i>Study area location</i>	27
3.2	<i>Surface geology map modified from Michaud et al. (1999)</i>	28
3.3	<i>Heterogeneity definition process leading to multiple 3D hydrogeological models</i>	29
3.4	<i>Borehole location on the studied site</i>	31
3.5	<i>GPR profiles location on the studied site</i>	32
3.6	<i>3D view of the geological model (top) and 2D cross-sections oriented to illustrate geological units distribution(bottom)</i>	33
3.7	<i>3D view of the TI used as an a priori for MPG simulations derived from the geological initial model (figure 3.6)</i>	34
3.8	<i>Samples of MPG simulations</i>	35
3.9	<i>Probability of occurrence for each HF simulated (1=100%)</i>	35
3.10	<i>Sample of SGS simulated K models</i>	38
3.11	<i>Mean hydraulic conductivity model (top) and log standard deviation (bottom) obtained combining all the simulated K distribution</i>	39
3.12	<i>Log standard deviation of simulated K models in one HF distribution scenario</i>	40
4.1	<i>Study area location</i>	46
4.2	<i>Geological initial model and AA' and BB' 2D cross-sections localisation</i>	48
4.3	<i>2D view of the hydrogeological conceptual model in the Griffin lake area (AA')</i>	48
4.4	<i>2D view of the hydrogeological conceptual model in the Laurie lake area and at the Jacques-Cartier river (BB')</i>	49
4.5	<i>Samples of MPG simulation results</i>	50

4.6	<i>Sample of SGS simulated K models</i>	51
4.7	<i>Boundary conditions of the groundwater flow model</i>	52
4.8	<i>Simulated vs observed hydraulic heads for the calibrated groundwater flow model</i>	54
4.9	<i>Map of the Simulated hydraulic heads for the calibrated groundwater flow model</i>	54
4.10	<i>Sensitivity analysis on constant head boundary B</i>	55
4.11	<i>Effect of HF distribution on mass transport</i>	58
4.12	<i>Effect of K distribution within one HF on mass transport</i>	59
4.13	<i>Exemple of decision-making tools : Probability map of overpassing a treshold</i>	59
4.14	<i>Mean model of the simulated K scenarios</i>	60
4.15	<i>Breakthrough curves comparison between simulated K models and the average K model</i>	60

Introduction

Contexte

Au cours des dernières années, une vigilance environnementale accrue a mené les Forces Canadiennes à conduire plusieurs études de caractérisation et d'impacts sur leurs sites d'entraînements et d'essais de plusieurs bases militaires à travers le pays. De plus, le contexte mondial exige que les troupes canadiennes maintiennent un niveau d'entraînement élevé en conditions réelles et utilisent du matériel hautement développé et testé intensivement. À cet effet, Recherche et Développement pour la Défense Canada (RDDC), une agence du ministère de la Défense nationale du Canada, exploite un secteur d'essais où des tests sur les équipements militaires sont effectués de façon courante. De telles activités utilisent des quantités variables de matériaux énergétiques, de métaux et de propulsifs. Ces composés se retrouvent en distribution spatiale et en concentrations hétérogènes sur les zones exploitées du secteur d'essais. Les activités de RDDC étant plus variées qu'intensives comparativement aux secteurs d'entraînement, l'interprétation des données environnementales résultantes sont plus complexes.

Dans ce contexte, RDDC Valcartier a mandaté l'Institut National de la Recherche Scientifique – Eau, Terre et Environnement (INRS-ETE) pour effectuer une étude sur l'écoulement de l'eau souterraine et le transport de contaminants au secteur d'essais de RDDC Valcartier. La première phase de l'étude avait comme objectif de faire l'inventaire des connaissances sur le site et des données provenant des études antérieures (Poulin-Talbot et al., 2007). La seconde phase a permis d'améliorer les connaissances hydrogéologiques du secteur ainsi que de mieux définir les sources de contamination et leur composition (Martel et al., 2009). Toutefois, la mobilité de ces contaminants et leur transport potentiel jusqu'aux eaux de surface restaient à définir. La compréhension de ces aspects est essentielle dans le contexte d'une approche par analyse de risque et gestion du risque.

Problématique

La gestion durable et la caractérisation de la ressource en eau souterraine ne peuvent être effectués que par la modélisation numérique des propriétés physiques des aquifères. Le secteur d'essais de RDDC-Valcartier repose sur une succession de couches sédimentaires principalement mises en place par un système deltaïque. Les modes de déposition impliqués dans la formation d'un environnement paléo-deltaïque génèrent un niveau élevé d'hétérogénéité stratigraphique influençant les processus liés à l'hydrogéologie des contaminants (Sudicky et al., 1983). La modélisation numérique de tels environnements présente d'importantes incertitudes rendant l'utilisation de méthodes déterministes inadéquates. En effet, la conductivité hydraulique de la matrice sédimentaire peut varier de plusieurs ordres de grandeurs sur une distance de quelques mètres. L'interpolation directe des unités selon des méthodes classiques entre les données de forages et l'assignation de conductivités hydrauliques moyennes à chacune des couches lisses ne peuvent tenir compte de la variabilité liée à l'hétérogénéité du système. L'écoulement souterrain et plus particulièrement le transport de contaminants sont influencés par la distribution spatiale des chemins préférentiels, un modèle lisse ignorerait la présence de ces derniers en partie ou en totalité (Anderson et al., 1999).

De plus, la modélisation numérique des systèmes d'écoulement souterrain et de transport de contaminants utilisant des méthodes déterministes envoie le mauvais signal aux gestionnaires de sites caractérisés. En fournissant un seul scénario possible de distribution de la contamination sur le site, il est suggéré que celui-ci est exact et donc représentatif de la réalité alors que plusieurs incertitudes sont présentes. Ces dernières ne sont pas quantifiées lors de la production d'une seule solution.

Objectif principal

Le mémoire présente une méthodologie permettant le développement d'outils décisionnels selon une approche probabiliste dans le but de soutenir la gestion durable des activités expérimentales sur un site d'étude environnementalement sensible.

Objectifs spécifiques

Afin de permettre la visualisation de la variabilité spatiale des différentes unités géologiques, l'intégration en 3D des données existantes et l'acquisition de mesures indirectes (géophysiques) doivent être réalisées. Il est nécessaire d'établir une séquence stratigraphique qui permettra éventuellement la construction de modèles géologiques et hydrogéologiques conceptuels basés sur l'intégration des données directes et indirectes.

Cet *a priori* géologique, permettra de construire une multitude de modèles géologiques 3D à haute résolution en utilisant des simulations géostatistiques qui respecteront les données disponibles et qui reproduiront l'hétérogénéité grande échelle. Ensuite, d'après les modèles construits, un *a priori* hydrogéologique et des données mesurées, plusieurs grilles 3D de la distribution spatiale de la conductivité hydraulique doivent être générées. Ces dernières seront également produites à partir de simulations géostatistiques. Une méthodologie doit être développée pour parvenir à reproduire des chemins d'écoulement préférentiel selon plusieurs scénarios et ainsi simuler les valeurs extrêmes. La méthode doit éviter le lissage.

La construction de plusieurs modèles hétérogènes de la conductivité hydraulique permettra de simuler différents scénarios d'écoulement souterrain et de transport de contaminants. À partir de ces résultats, des outils décisionnels tels que cartes de variabilité et de probabilité de contamination pourront entre autres être produites.

Structure du mémoire

Le présent mémoire, sous forme d'articles, présente le développement d'une approche probabiliste pour la modélisation du transport de contaminants selon l'utilisation de méthodes géostatistiques et son application sur un site d'étude. Le site est situé à 20 km au nord-ouest de Québec dans le secteur Valcartier.

Un premier chapitre présente une brève revue des approches développées pour caractériser l'hétérogénéité des aquifères. Un deuxième chapitre décrit le contexte géologique et hydrogéologique du site à l'étude. L'intégration dans une interface 3D des données disponibles et le traitement des mesures acquises y est présenté. La construction d'un modèle conceptuel géologique résultant de cette démarche y est détaillée. Le chapitre 3 comprend le premier article qui décrit l'approche de modélisation géostatistique visant la définition de l'hétérogénéité du système paléo-deltaïque du terrain d'étude. En plus

d'y présenter la démarche utilisée, un échantillon de la totalité des modèles d'hydrofaciès et de la conductivité hydraulique est fourni accompagné d'une brève analyse statistique. Le chapitre 4 contient un 2^e article traitant brièvement la démarche développée dans le premier article et présente l'intégration des modèles de K en simulation d'écoulement souterrain et de transport de masse. Les résultats de parcours d'un contaminant depuis sa source selon différents scénarios sont présentés ainsi que quelques données statistiques pouvant servir d'outil décisionnel. Finalement, la totalité des modèles de transport de contaminants simulés est comparée avec la moyenne des modèles de conductivité hydraulique.

Les annexes ont pour but de fournir des données complémentaires, les données brut et quelques tableaux et cartes pertinents. Un annexe DVD est également fourni avec le mémoire.

Chapitre 1 : Revue des méthodes de caractérisation de l'hétérogénéité des aquifères

Les aquifères sédimentaires se trouvent dans des matrices mises en place par des processus géologiques complexes qui se sont déroulés sur de longues périodes. Ainsi, il en résulte des structures présentant une hétérogénéité latérale et verticale importante de la taille des grains, de la porosité, de la tortuosité et de la conductivité hydraulique (K). Cette haute variabilité spatiale du milieu souterrain influence les processus hydrogéologiques y prenant place tels que l'écoulement souterrain et le transport de contaminants. En effet, il existe une corrélation entre la nature et la distribution des faciès géologiques, et les variations de K dans un aquifère. Cette dernière propriété représente une caractéristique centrale des écoulements et du transport dans l'eau souterraine. Par contre, les mesures directes de K sont bien souvent échantillonnées à haute résolution sur un volume très faible comparativement à celui des aquifères étudiés ou à faible résolution, mais à l'échelle de l'écartement entre les forages. Il est donc important d'établir des relations avec la géologie et de tenter de générer des champs continus des propriétés hydrauliques en faisant appel à la modélisation numérique.

Dans les problématiques de représentation de l'hétérogénéité en hydrogéologie le développement des modèles numériques a permis la définition des différentes géométries des systèmes aquifères et l'intégration de propriétés hydrauliques variables dans l'espace. À cet effet, plusieurs méthodes ont été développées au cours des dernières décennies pour générer des champs de propriétés hydrauliques tenant compte de l'hétérogénéité. Ces approches sont regroupées en trois grandes familles : les méthodes descriptives, celles d'imitation de procédé et les techniques d'imitation de structure.

1.1 Approches descriptives

Les approches descriptives s'inscrivent dans les méthodes de caractérisation déterministes, ne reproduisant qu'une seule image de l'architecture de l'aquifère. Elles consistent en l'adaptation d'un modèle géologique conceptuel de déposition aux mesures de K en forage et aux observations en surface disponibles pour le site à l'étude. Elles impliquent également l'assignation de propriétés hydrauliques uniques et constantes pour chacun des faciès hydrostratigraphiques (Fogg, 1986).

1.2 Imitations de procédés

Les approches de caractérisation de l'hétérogénéité par imitation de procédé utilisent des modèles mathématiques pour reproduire les processus hydrogéologiques d'écoulement et de transport ou les processus diagénétiques et de sédimentation.

1.2.1 Reproduction des données hydrogéologiques

Les techniques visant la reproduction des données hydrogéologiques utilisent les équations d'advection et de dispersion en eaux souterraines pour générer des modèles fournissant des résultats le plus représentatif possible des données observées. Cet objectif est atteint selon deux méthodologies distinctes : le calibrage sur les données de transport et d'écoulement et l'inversion. Cette dernière technique fait appel à l'inversion de données ponctuelles de K , de transmissivité (T) et de charges hydrauliques (H) pour générer des champs en 2 ou 3D de T (Dagan, 1985). Quant au calibrage, il consiste en l'ajustement d'un champ de T ou K *a posteriori* pour obtenir une parité entre les résultats simulés et observés.

1.2.2 Reproduction des processus géologiques

Cette approche a pour objectif de reconstituer les événements de déposition pour construire un modèle géologique présentant les différents arrangements spatiaux granulaires et leur période de mise en place. Pour y parvenir, des équations de transport de sédiments et de conservation de masse sont utilisées.

1.3 Imitation de structure

Les techniques imitant la structure sont orientées vers la production d'images tentant d'illustrer l'architecture et/ou les propriétés hydrauliques des aquifères en utilisant des contraintes spatiales reproduisant les géométries influençant l'écoulement de l'eau souterraine et le transport de contaminants. Il existe deux grandes familles d'approches par imitation de structure : celle visant la reproduction du patron de sédimentation et les techniques géostatistiques.

1.3.1 Reproduction du patron de sédimentation

Les méthodes de reproduction du patron de sédimentation (Bridge, 1975; Webb, 1994) visent la construction de modèles représentatifs de la géologie d'après un modèle conceptuel, des règles géométriques et des outils probabilistes. Les techniques les plus courantes de cette famille utilisent les données dures, non pas comme données conditionnantes mais plutôt *a posteriori* pour un calibrage. La marche aléatoire, les modèles analytiques de sédimentation, l'avulsion aléatoire et les modèles stratigraphiques font partie de cette catégorie.

1.3.2 Approches géostatistiques

Les méthodes géostatistiques, fondées sur des modèles de corrélation et de connectivité spatiale, peuvent se diviser en deux grandes catégories : les approches déterministes et les méthodes de simulations.

Méthodes déterministes

Le krigeage (Matheron, 1963) est probablement la méthode géostatistique la plus répandue et son principe est à la base de plusieurs autres outils d'interpolation. C'est une méthode d'interpolation utilisant une combinaison linéaire des données dures adjacentes pour assigner des valeurs aux endroits non-échantillonnés. Le krigeage constitue le meilleur interpolateur linéaire sans-biais et minimise la variance d'estimation. Il existe deux catégories principales de krigeage : simple et ordinaire.

D'autres types de krigeage peuvent aussi être utilisés selon les paramètres du domaine à modéliser. Lorsque les données suivent une tendance spatiale connue, il est possible de procéder au krigeage avec dérive externe (Goovaerts, 1997). Cette méthode permet d'éliminer la dérive des données afin de procéder au krigeage seulement sur les résidus. Une autre méthode déterministe utilisant le krigeage peut être employée dans les cas où des observations secondaires sont disponibles et corrélées à la variable primaire qu'il faut interpoler. En effet, le cokrigeage (Deutsch and Journel, 1992) permet de tirer de l'information d'une variable externe corrélée au domaine à interpoler pour générer des champs de propriétés hydrauliques. Le krigeage est utilisé pour des valeurs continues et est donc adapté à la reproduction de champs de propriétés hydrauliques. Cependant, il est possible d'avoir recours au krigeage d'indicatrice (Journel, 1983) afin de réaliser une interpolation de faciès.

Méthodes de simulation

Contrairement aux méthodes déterministes, les simulations géostatistiques ne fournissent pas seulement une solution, mais sont utilisées pour produire une infinité de possibilités de solutions équiprobables. Elles peuvent être conditionnelles ou non et il est possible de les regrouper en trois catégories distinctes : les méthodes par objet, les simulations de variables continues (propriétés hydrauliques) et les simulations de variables catégoriques (faciès ou hydrofaciès).

Les méthodes de simulations par objets, contrairement aux simulations «basées-pixel», reconstruisent une image en générant chacune des structures d'intérêt d'un seul coup et non pas point par point. Ces techniques utilisent les modèles booléens (Matheron, 1967) et ses dérivés afin de modéliser le plus souvent des structures géométriques simples (e.g. failles, chenaux) facilement qualifiables selon leur taille, leur position et leur orientation.

Pour produire des réalisations de champs de variables continues, plusieurs techniques peuvent être utilisées dépendamment de la quantité disponible de données et de leur structure spatiale. La décomposition matricielle LU («lower-upper») de *Cholesky* n'utilise pas de processus séquentiel et peut s'avérer efficace pour simuler un nombre de points relativement petit (moins de 2000 points). Par contre, lorsque le nombre de points augmente significativement, la décomposition matricielle demande beaucoup de temps de calcul ordinateur et peut induire des instabilités numériques. Pour des grilles de tailles plus importantes, des simulations séquentielles gaussiennes (SGS) peuvent être utilisées lorsque les données dures ont une distribution gaussienne et le conditionnement doit être effectué avec les plus proches voisins car le système de krigeage ne

peut être résolu. Pour générer des modèles 2D ou 3D de variables continues la méthode des bandes tournantes (Matheron, 1973), des transformés rapides de Fourier (FFT) et celles à moyenne mobile (FFT-MA) (Ravalec et al., 2000) peuvent être utilisées.

Les simulations de variables catégoriques appliquées à l'hydrogéologie sont basées sur le principe que les matériaux géologiques peuvent être regroupés selon leurs propriétés hydrauliques en hydrofaciès (HF). Ces techniques impliquent la génération par simulations géostatistiques de champs 2D ou 3D de différentes classes HF pour ensuite assigner les valeurs des propriétés hydrauliques. Le produit final demeurant un champs de conductivité hydraulique (K) construit pour la modélisation numérique de l'écoulement souterrain et du transport de masse. Il existe plusieurs possibilités pour y parvenir. Les simulations séquentielles d'indicatrices (Journel and Alabert, 1989) permettent de construire de telles grilles. C'est une approche fastidieuse, mais très flexible car elle permet de travailler avec des données non-gaussiennes. Afin de permettre la reproduction de relations complexes entre différents faciès, la simulation plurigaussienne tronquée représente un outil efficace. Elle implique la génération de champs gaussiens et leur troncature dans le but d'obtenir des variables catégoriques. Elle permet également l'assignation de règles lithologiques contraignant les résultats de simulations. Une application à la caractérisation d'un aquifère est présenté dans Mariethoz et al. (2009). Enfin, une méthode gagnant en popularité et ne requérant pas la production d'un variogramme est la géostatistique multi-points (MPG). Cette méthode utilise une image d'entraînement (*training image*) et les données dures disponibles pour reproduire certaines structures sur des modèles simulés. Le concept a été introduit par Guardiano and Srivastava (1993) et un algorithme utilisant un arbre décisionnel pour alléger les étapes de calcul ordinateur a été développé par Strebelle and Journel (2000).

1.4 Approche sélectionnée

Afin de sélectionner la technique convenant le mieux à l'atteinte des objectifs fixés, l'historique du site, les données disponibles et le champs d'expertise des intervenants du projet ont été considérés. Il fallait également évaluer les ressources matérielles disponibles et le type de résultats attendu. La grande disponibilité de données structurales directes telles que les observations géologiques de surface et descriptions de forage ainsi que la possibilité d'acquérir des mesures indirectes (levés géophysiques) sur le site a justifié le choix d'une approche par imitation de structure.

La géologie du site à l'étude présentant un niveau élevé d'hétérogénéité, l'utilisation d'une méthode déterministe a été jugé inadéquate. La grande variabilité des

faciès, induisant de l'incertitude au niveau des propriétés hydrauliques, des paramètres d'écoulement souterrain et incidemment du transport de contaminants, a justifié le choix d'une technique par simulations géostatistiques. Cette option permet la réalisation de scénarios équiprobables et ainsi de quantifier l'incertitude sur la géométrie des unités géologiques et de fournir des cartes probabilistes et de la variabilité. De plus, la présence de variations de plus de quatre ordres de grandeur sur les données mesurées de K indique l'existence hautement probable de chemins préférentiels. Une technique de type krigeage tendrait plutôt à fournir un modèle unique lissé négligeant ces voix rapides de transport de contaminants.

Lors des travaux antérieurs sur le site d'étude, un modèle stratigraphique préliminaire utilisant une approche descriptive a été construit. Au tout début du présent projet, ce modèle descriptif a été modifié d'après les nouvelles données directes et indirectes disponibles. L'accès à un tel modèle et la volonté d'utiliser des données catégoriques a orienté le choix de l'utilisation des MPG. Cette méthode est conçue pour modéliser la continuité spatiale des structures comme les chemins préférentiels d'écoulement et de transport. Elle permet de fournir de l'information au-delà des statistiques conventionnelles à deux points et des limitations des méthodes utilisant un variogramme (Feyen and Caers, 2004).

Pour ce qui est de l'assignation des propriétés hydrauliques à chacune des variables catégoriques (HF), il a été choisi d'assigner les valeurs de K selon les caractéristiques des HF. Par contre, considérant que la variabilité des structures à plus petite échelle a un effet sur la dispersion lors de la modélisation du transport de contaminants, il a été choisi d'utiliser à nouveau des simulations géostatistiques pour assigner K aux HF. L'utilisation de SGS pour cette opération a été justifiée par la possibilité de réaliser les simulations indépendamment pour chacun des faciès et d'imposer des limites inférieures et supérieures aux valeurs simulées. Cette technique est également utilisée pour caractériser l'échelle *sub-HF* d'un interface rivière aquifère par Frei et al. (2009).

Chapitre 2 : Géologie des formations superficielles du secteur d'essais

2.1 Interprétation de la géologie de surface et du quaternaire

Les paragraphes suivants décrivent la nature et l'origine des unités rencontrées dans le secteur à l'étude, de la plus récente à la plus ancienne (incluant le socle rocheux). Ces descriptions sont tirées de Michaud et al. (1999), de même que des observations effectuées lors de la campagne de terrain de l'INRS-ETE en octobre 2005. La figure 2.1 présente la géologie de surface du secteur d'essais.

Alluvions actuels (Ap ; aquifère) :

Cette unité est généralement constituée de sable, silt sableux, sable graveleux et gravier stratifiés contenant fréquemment de la matière organique. L'épaisseur de cette unité varie entre 0,5 et 3 m.

Alluvions des terrasses fluviales (At ; aquifère) :

Cette unité est généralement constituée de sable, silt sableux, sable graveleux et gravier stratifiés contenant peu de matières organiques. De plus, dans le secteur d'essais, il n'est pas rare de trouver des lits de galets plus ou moins imbriqués dans cette unité.

Sédiments deltaïques (Md ; aquifère) :

Cette unité est constituée de silt, sable, sable graveleux et gravier, stratifiés et bien

triés. Des galets épars ont aussi été observés dans les excavations et dans les talus d'éboulis associés à cette unité. D'après Michaud et al. (1999), l'unité peut atteindre jusqu'à 40 m d'épaisseur. Les sédiments ont été mis en place à l'embouchure des cours d'eau se déversant dans la Mer de Champlain. La topographie de cette unité est relativement plane et marquée par des chenaux abandonnés. Certaines zones ont également été remaniées en surface par l'action éolienne.

Sédiments prodeltaïques (F ; généralement un aquitard) :

Ces sédiments représentent une unité plus ou moins continue constituée d'une alternance de silts, de silts argileux et de sables fins silteux. La présence et la continuité de cette unité dans la partie nord et nord-ouest du secteur d'essais génèrent des conditions de nappe perchée et d'aquifère semi-captif. Cette unité n'apparaît pas en surface du secteur d'étude.

Sédiments proglaciaires (Gx ; aquifère) :

Il s'agit d'une unité constituée de sable et gravier, de blocs, et qui contient parfois des lentilles de till ou de diamicton. Son épaisseur peut atteindre 30-40 m formant des eskers et autres formes typiques développées en contact avec la glace par les eaux de fonte lors de la déglaciation du territoire.

Till (T ou Tv ; généralement un aquitard) :

Sédiments mis en place directement par la glace, i.e. sans remaniement subséquent par les eaux de fonte. Ce type de sédiments est mal trié, généralement peu ou pas stratifié, et consiste en un mélange hétérogène d'argile, silt, sable, gravier et blocs sub-anguleux. Dans le secteur d'étude, le till semble particulièrement riche en blocs anguleux. On y distingue deux faciès : le till de fond et le till d'ablation. Le till de fond est généralement plus massif et moins perméable que le second. Toutefois, l'abondance de blocs dans les deux faciès suggère que le till puisse être assez perméable dans ce secteur. Le till d'ablation forme une mince couche qu'on rencontre en surface dans les secteurs situés au-dessus de la limite marine maximale. Celle-ci varie de 210 à 225 m dans cette partie du piémont laurentien.

Roc (R ; aquifère fracturé) :

Roches ignées métamorphiques du Bouclier canadien. Ces roches forment des surfaces très irrégulières et bosselées. Au-dessus de la limite marine, les surfaces rocheuses sont généralement recouvertes de minces placages discontinus de till et sont parsemées

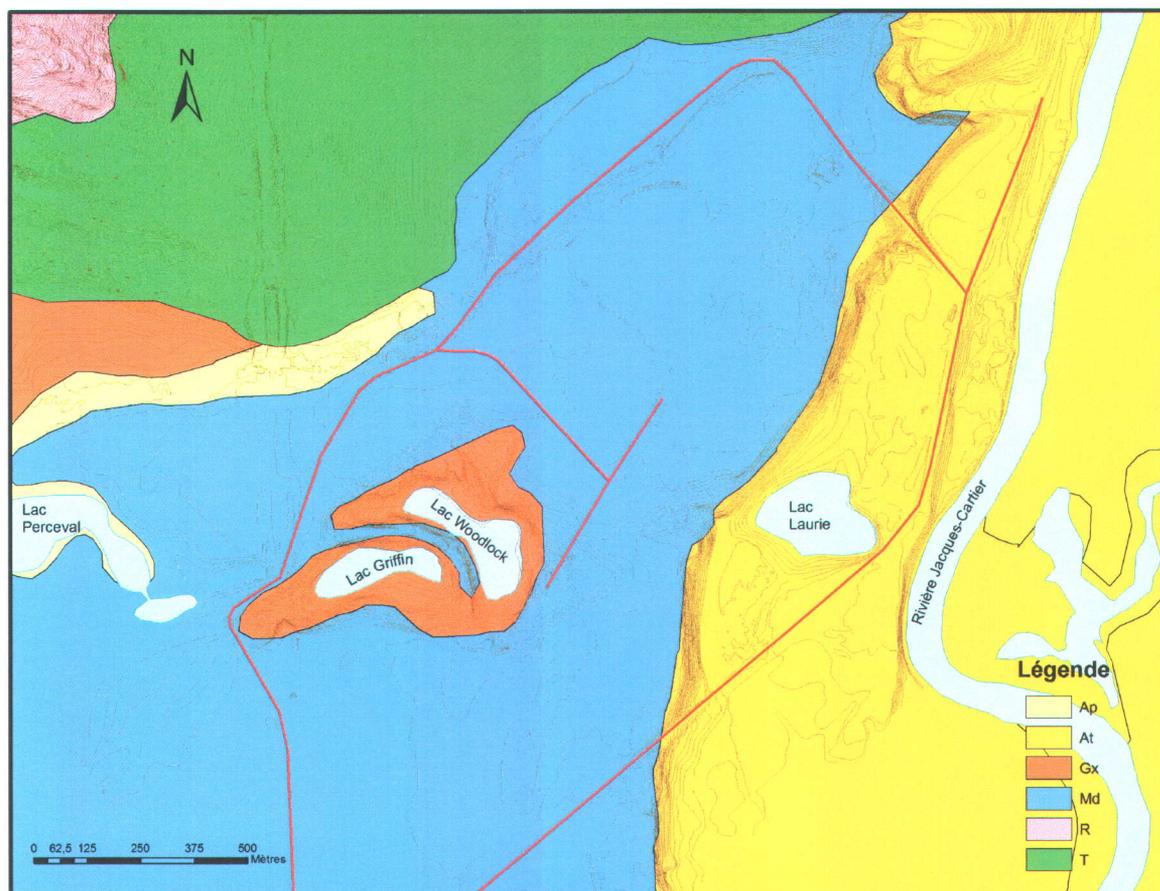


Figure 2.1 – Géologie de surface du secteur d'essais

de blocs épars. Sous la limite marine, les surfaces rocheuses sont généralement délavées de sédiments quaternaires.

2.2 Travaux de terrain

Les travaux de terrain présentés dans ce rapport ont été effectués lors de 3 campagnes s'échelonnant entre le mois de septembre 2008 et octobre 2009. Les résultats des mesures de terrain de ces campagnes sont principalement utilisés pour fournir des résultats qualitatifs sur différents aspects géologiques et hydrogéologiques du secteur d'essais. Par contre, dans le cas du radar géologique, certains contacts stratigraphiques et piézométriques sont quantifiés en profondeur et en étendue.

2.2.1 Levés géophysiques électromagnétiques (radar géologique)

Principe de base du géoradar

Le géoradar est une méthode géophysique qui permet de cartographier les interfaces entre des structures souterraines présentant un contraste de permittivité diélectrique. Dans un milieu poreux comme des sables, la variation de la teneur en eau est le facteur principal déterminant ce contraste. Ainsi, une variation de la porosité et/ou de la saturation en eau dans le milieu génère une réponse mesurable si (1) le contraste est suffisamment élevé pour générer un signal plus énergétique que le bruit ambiant, et (2), si ce contraste se situe à une profondeur incluse à l'intérieur des limites de détection de la méthode.

Le principe d'opération est le suivant. Une impulsion électromagnétique de haute fréquence (10 à 1000 MHz) est émise par une antenne. Cette impulsion induit une onde électromagnétique (EM) qui se propage dans le sol. Lorsque cette onde parvient à une structure présentant un contraste de propriété diélectrique, une partie de l'énergie de l'onde est réfléchi ou réfractée. L'énergie réfléchi et réfractée est enregistrée à une antenne réceptrice. La mesure de l'amplitude de cette onde en fonction du temps permet de construire une image du sous-sol.

L'onde EM est atténuée dans le sol et sa profondeur de pénétration est finie. La fréquence de l'onde et la conductivité électrique du milieu dictent la profondeur de pénétration de l'onde. Plus la fréquence est basse plus l'onde EM pénètre profondément. Plus la conductivité électrique des matériaux est élevée moins l'onde EM pénètre pour une même fréquence. La fréquence influence également la résolution de la technique, c'est-à-dire la capacité à imager des objets ou structures de petites dimensions. Plus la fréquence est élevée, meilleure est la résolution. Les équipements peuvent être utilisés avec des antennes de différentes fréquences et il s'agit de déterminer quelles antennes offrent le meilleur compromis entre pénétration et résolution. Les résultats sont présentés sous forme d'une coupe transversale où la profondeur relative est estimée en temps aller-retour des ondes.

Configuration et matériel requis

L'appareil utilisé pour les levés au secteur d'essais est le pulseEKKO® de Sensors and Software® prêté pour la durée des travaux par la CGCQ. Les antennes de 50 MHz ont été choisies car elles permettaient de définir la couche imperméable de 20-30 mètres

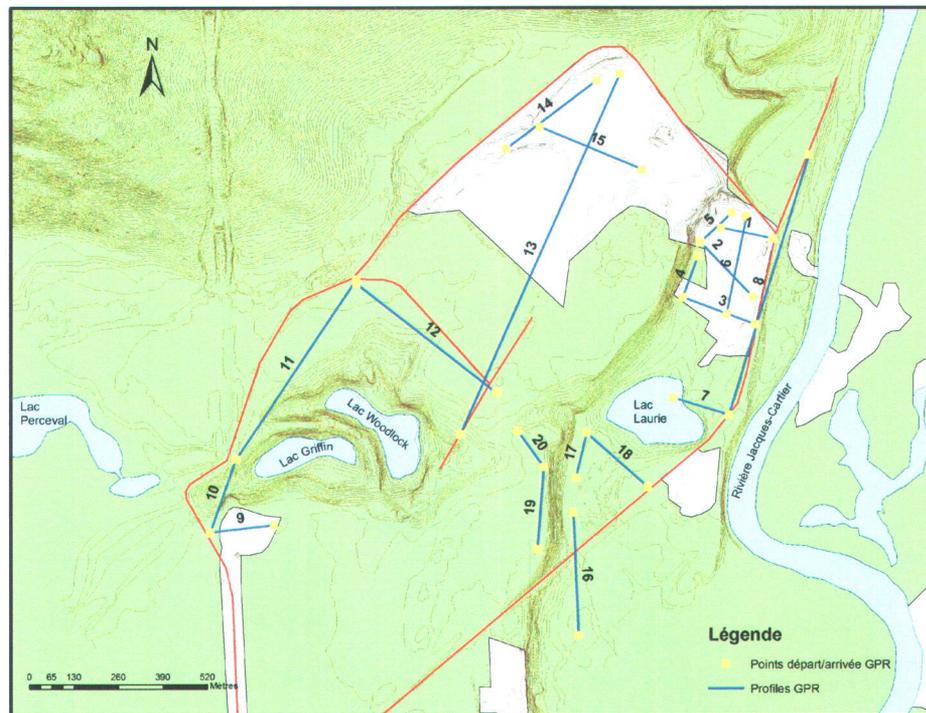


Figure 2.2 – Position des levés géoradar

de profondeur qui se trouve sous des dépôts sablonneux électriquement résistants. Comme l'utilisation du géoradar est particulièrement efficace dans les matériaux résistifs comme le sable et le gravier, cette technique est appropriée pour le terrain d'étude. Toutefois, 20-30 mètres de pénétration est la limite maximale. Les levés au secteur d'essais ont donc été effectués avec les antennes de 50 MHz et un émetteur de 1000 volts. L'espacement entre les antennes émettrice et réceptrice était de 2 m. Le pas d'échantillonnage spatial était de 40 cm.

Localisation des levés

La position des 20 levés géoradar effectués le 23 septembre et le 11 novembre 2008 est présentée à la figure 2.2. Ces levés sont distribués sur presque tout le territoire à l'étude et se concentrent sur le plateau et le long du secteur 307.

Traitement du signal

Le traitement du signal, i.e. la mise en évidence des réflecteurs dans les fichiers contenant les traces des levés, a été réalisé à l'aide du logiciel Reflex (Sandmeier Scientific

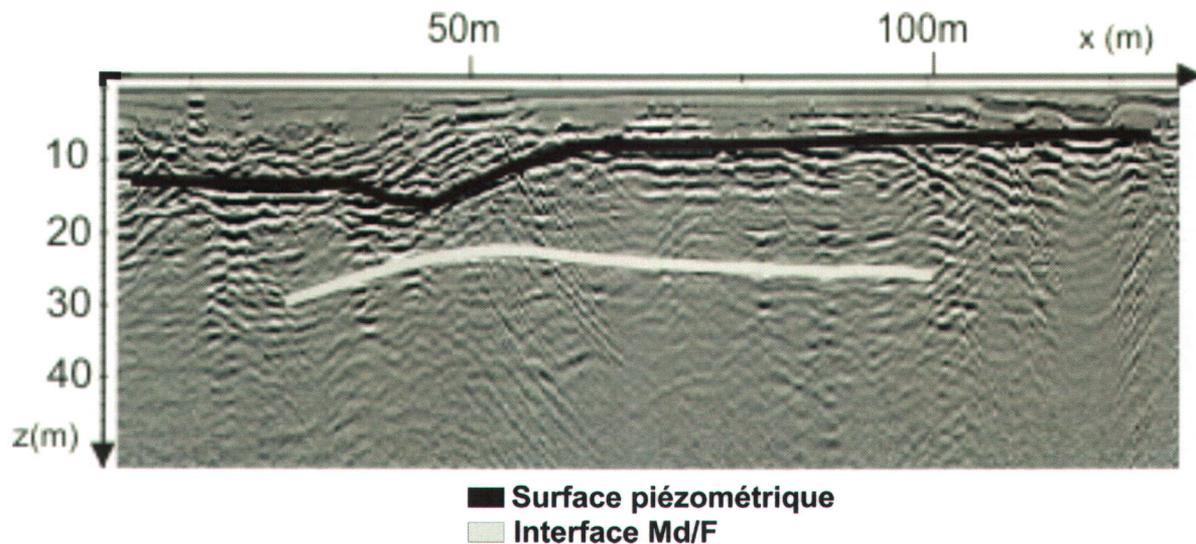


Figure 2.3 – Exemple d'interprétation d'un levé géoradar. Données filtrées, levé #2

Software, Karlsruhe, Germany). Cette opération s'est effectuée en 6 étapes :

1. Suppression de la composante basse fréquence : Filtre De-wow
2. Compensation latérale des amplitudes (Spatial Gain)
3. Correction de temps liée à la dérive électronique par correction statique
4. Compensation verticale des amplitudes (Time Gain)
5. Atténuation de l'arrière-plan (Background Removal)
6. Corrections topographiques

Interprétation des levés

Afin d'obtenir une interprétation réaliste de données géophysiques, une connaissance de la géologie en place sur le site à l'étude est primordiale. En intégrant les données de forages et des relevés piézométriques des campagnes précédentes aux profils géoradar, certains contacts stratigraphiques, de même que la position de la nappe libre ont pu être mis en évidence. La figure 2.3 présente un exemple d'interprétation du levé #2 avec les données filtrées.

Le profil de la figure 2.3 a été acquis dans le secteur 307 et expose le contraste de teneur en eau à la surface piézométrique (ligne noire). Un contact avec une lentille discontinue de silt est également visible sur une portion du profil (ligne grise).

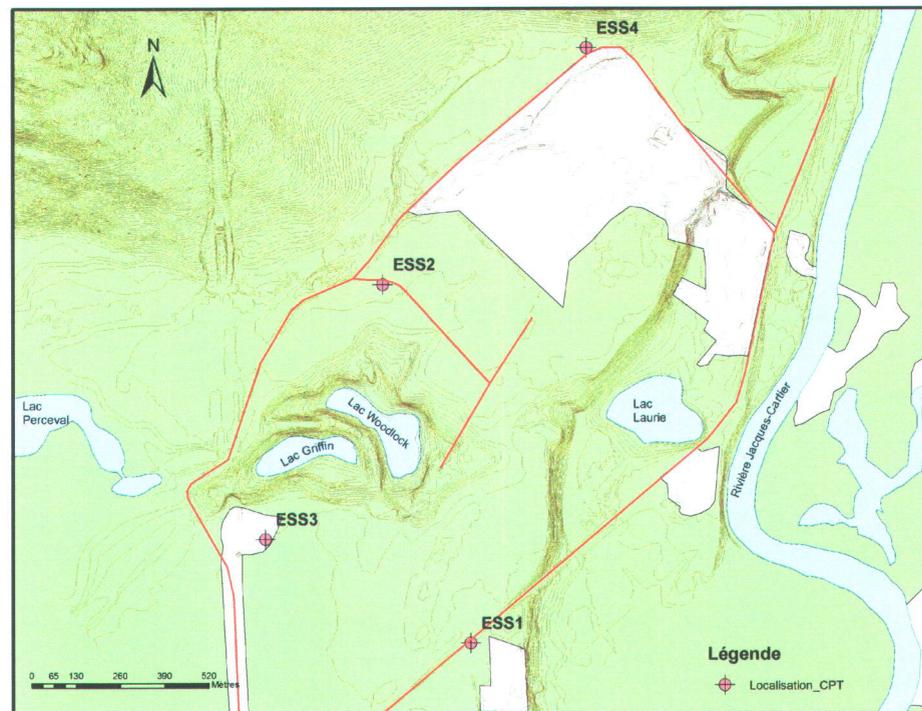


Figure 2.4 – Localisation des sondages CPT

2.2.2 Essais de pénétration au cône (CPT)

Les essais de pénétration au cône (CPT) permettent de mesurer plusieurs paramètres physiques (résistance en pointe, friction, pression des pores en continu, stratigraphie, conditions hydrauliques) des sols y enfonçant une sonde à vitesse constante (Fauveau, 2006; Shinn et al., 1998).

Dans la présente étude, 4 sondages CPT ont été effectués sur le secteur d'essais afin de valider la description des hydrofaciès et dans le but de mieux définir l'étendue de la nappe perchée de la partie nord-ouest du secteur. La figure 2.4 montre la localisation des essais par enfoncement direct réalisés à l'automne 2009.

Interprétation des sondages CPT

Les sondages CPT ont permis de renforcer les hypothèses du modèle géologique et de mieux définir les limites et les unités hydrostratigraphiques du modèle d'écoulement. Les quatre emplacements où les essais ont eu lieu ont été choisis dans le but de représenter quatre environnements géologiques et hydrogéologiques du secteur d'essai. Le sondage

ESS1 situé dans la partie sud du secteur d'essais, expose un environnement beaucoup plus homogène et très sableux sur plus de 25 mètres. Il confirme la présence de dépôts proglaciaires profonds plus perméables. Le sondage ESS2 expose la grande hétérogénéité du secteur au nord-est des lacs Griffin et Woodlock. Ainsi, une séquence de sable et de sédiments silteux interlités est observée dans les 15 premiers mètres. Le sondage ESS4, situé dans la partie nord du secteur, à l'est du bâtiment 311, montre une stratigraphie silteuse peu perméable. Les sondages CPT ESS1, ESS2, ESS4 sont présentés à l'annexe A. Le sondage ESS3, situé au nord-ouest de la zone à l'étude est quant à lui montré à la figure 2.5.

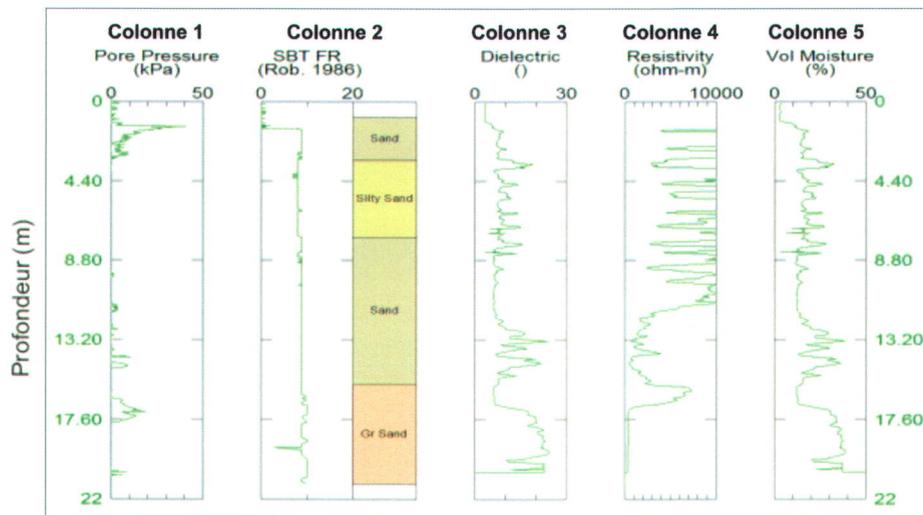


Figure 2.5 – Résultats du sondage CPT ESS3

Cette figure démontre de deux façons la présence d'une nappe perchée et d'un aquifère semi-confiné à l'emplacement du sondage ESS3. La colonne stratigraphique (2^e colonne, figure 2.5) renseigne sur la granulométrie des unités géologiques calculée à l'aide des relations de Robertson et al. (1986). Le mélange silt et sable forme une barrière peu perméable sous le sable tandis que la portion plus grossière en profondeur fait partie de l'aquifère principal du secteur d'essais. L'autre indice de cette présence de deux milieux hydrogéologiques provient de la résistivité mesurée (4^e colonne). À une profondeur d'environ 18 mètres, la résistivité du milieu diminue de façon importante laissant supposer un environnement plus conducteur donc plus minéralisé (eau plus vieille).

2.3 Travaux antérieurs revus et intégrés

La caractérisation de la géologie des formations superficielles du site à l'étude a été intégrée en intégrant plusieurs données mesurées, traitées et interprétées dans les études

menées précédemment sur le secteur d'essais (Poulin-Talbot et al., 2007). Les travaux de modélisation nécessitent une connaissance approfondie du système géologique et hydraulique, et l'intégration de jeu de données provenant de plusieurs sources. Ainsi, certaines de ces informations ont dû être réinterprétées ou parfois intégrées selon un nouveau classement.

2.3.1 Définition des hydrofaciès

Les données stratigraphiques de forage ainsi que les informations de géologie du quaternaire de surface ont été regroupées en faciès de conductivité hydraulique ou hydrofaciès (HF). Ainsi, les unités géologiques et les descriptions de forage correspondant à des propriétés hydrauliques semblables ont été groupées en 6 sous-ensembles dont 4 ont été retenus pour la modélisation de l'aquifère. Le tableau 2.1 expose ce classement.

Table 2.1 – Description sommaire des groupements par hydrofaciès (HF)

HF No.	Unité Stratigraphique Correspondante	Description Géologique typique
1	Roc métamorphique (R)	Gneiss du Bouclier Canadien Canadian Shield
2	Till (T)	Blocs sub-anguleux, présence d'argiles, mélange hétérogène
3	Sédiments proglaciaires, juxtaglaciaires (Gx)	Sable et gravier grossier, présence de blocs
4	Silts prodeltaïques (F)	Silt argileux, silt, silt sableux, stratifié
5	Sédiments deltaïques (Md)	Sables (fins, moyens, grossiers)
6	Alluvions des terrasses fluviales (At)	Sables et graviers (présents en surface et près de la rivière)

Le lien entre les HF et les données stratigraphiques a été réalisé selon un classement établi précédemment pour la région deltaïque de Valcartier (Ouelon et al., 2008). Les codes granulométriques établis par la CGQ (Parent et al., 2003) assignés initialement à chacune des descriptions de forage ont pu être convertis en un numéro d'hydrofaciès associé à une distribution de valeurs de conductivités hydrauliques. La figure 2.6 montre un exemple de conversion.

Nom	De	A	Description	Code C.C.O
Biogenie_juillet2005_E2_15	0	1.8	Sable graveleux, présence de cailloux.	S,G
Biogenie_juillet2005_E2_15	1.8	7	Sable moyen à fin, traces de silt.	F2
Biogenie_juillet2005_E2_15	7	14.9	Sable moyen à fin silteux, traces d'argile.	S,F1
Biogenie_juillet2005_E2_15	14.9	19.4	Silt sableux, traces d'argile.	F2
Biogenie_juillet2005_E2_15	19.4	27.5	Silt sableux, un peu d'argile.	F2
Biogenie_juillet2005_E2_15	27.5	30.8	Sable moyen à fin.	S
Biogenie_juillet2005_E2_15	30.8	33.6	Sable moyen à fin, traces de silt, un peu de cailloux.	D2

X	Y	Élévation	# HF
3089 36.00	520 0349.00	161.10	6
3089 36.00	520 0349.00	157.60	5
3089 36.00	520 0349.00	151.05	5
3089 36.00	520 0349.00	144.85	4
3089 36.00	520 0349.00	138.55	4
3089 36.00	520 0349.00	132.85	5
3089 36.00	520 0349.00	129.80	3

Figure 2.6 – Exemple de conversion des données de description de forage en HF

2.3.2 Intégration de la géologie de surface

Les informations de la géologie de surface du secteur d'essais ont également été regroupées en HF afin de produire le modèle hydrostratigraphique 3-D. Ces données ont permis de contraindre la construction du modèle 3-D des formations superficielles.

2.4 Construction du modèle géologique 3-D

Dans le but de mieux représenter la distribution spatiale des milieux géologiques, un modèle 3D du secteur d'essais de RDDC Valcartier a été produit à l'aide du logiciel Gocad®. Cette approche par géomodélisation se définit comme l'ensemble des méthodes mathématiques permettant de modéliser de façon unifiée et reproductible, la topologie, la géométrie et les propriétés physiques des objets géologiques en intégrant tous les types de données liés à ces objets. Le choix du logiciel Gocad® de la société Paradigm® a été fait car il permet d'effectuer toutes les étapes de géomodélisation, i.e., l'importation et la visualisation 3D de données de différents types (radar géologique, forages, géologie de surface, etc.), la création des différentes interfaces entre les unités et la modélisation numérique des propriétés hydrauliques à l'intérieur des unités. Au cours des dernières années, plusieurs forages ont été effectués dans la zone à l'étude.

L'information sur les forages a été colligée dans un fichier comprenant : le positionnement géographique ; la profondeur et la nature des matériaux rencontrés dans chaque forage. Les données ponctuelles de forages renseignent sur la nature et l'épaisseur des matériaux du sous-sol et sont très utiles pour délimiter les contacts stratigraphiques ainsi que pour l'interprétation des données géophysiques. Les sous-sections suivantes décrivent certaines étapes de la construction du modèle 3D depuis l'intégration de coupes stratigraphiques jusqu'à la création des unités en volume.

2.4.1 Coupes stratigraphiques

La visualisation en trois dimensions peut poser certains défis au niveau de la reconnaissance de la profondeur des objets. Ce problème peut parfois mener à des erreurs d'interprétation. Afin de minimiser l'impact sur la modélisation, plusieurs coupes stratigraphiques ont été construites. Le logiciel *Traverse*© développé par la CGC-Québec permet de projeter l'image des descriptions des forages se trouvant à proximité d'une coupe géoréférencée. Il est possible de choisir la distance maximale de projection des forages sur la coupe. La figure 2.7 présente un exemple d'une de ces coupes. Comme démontré, il est possible de visualiser les limites supérieures (surface topographique) et inférieure (surface du roc) afin d'obtenir une référence spatiale en profondeur. La pertinence de produire de telles coupes provient de la possibilité d'y apposer des interprétations dans le logiciel *CorelDraw*® et de les intégrer par la suite dans l'interface 3D *Gocad*®. À la figure 2.7, les contacts supérieur et inférieur d'une interface silteuse lissée (sédiments fins) ont été interprétés en reliant les descriptions de forages. Ces interprétations ont permis la construction de surfaces par interpolation des contacts sur l'ensemble de la zone. Également, une telle coupe démontre assez exhaustivement l'hétérogénéité du milieu et la nécessité d'un regroupement par hydrofaciès.

2.4.2 Création de surfaces interpolées

Cette section discute de la dernière étape avant la création des volumes 3D des unités stratigraphiques. Ces surfaces doivent venir en paires, soit une délimitant le haut de l'unité et une pour délimiter le bas afin de générer des volumes fermés. Les surfaces doivent couvrir l'étendue latérale de l'unité. La construction des volumes et des surfaces utilise des points de contact et des courbes (par exemple obtenues sur les profils géoradar) servant de contraintes à l'interpolation. Les interprétations en courbes telles que présentées aux figures 2.3 et 2.7 sont utilisées comme des points des descriptions de forages. Les surfaces sont alors interpolées entre les points de contrôle avec l'inter-

polateur DSI (discrete smooth interpolator) de Gocad®.

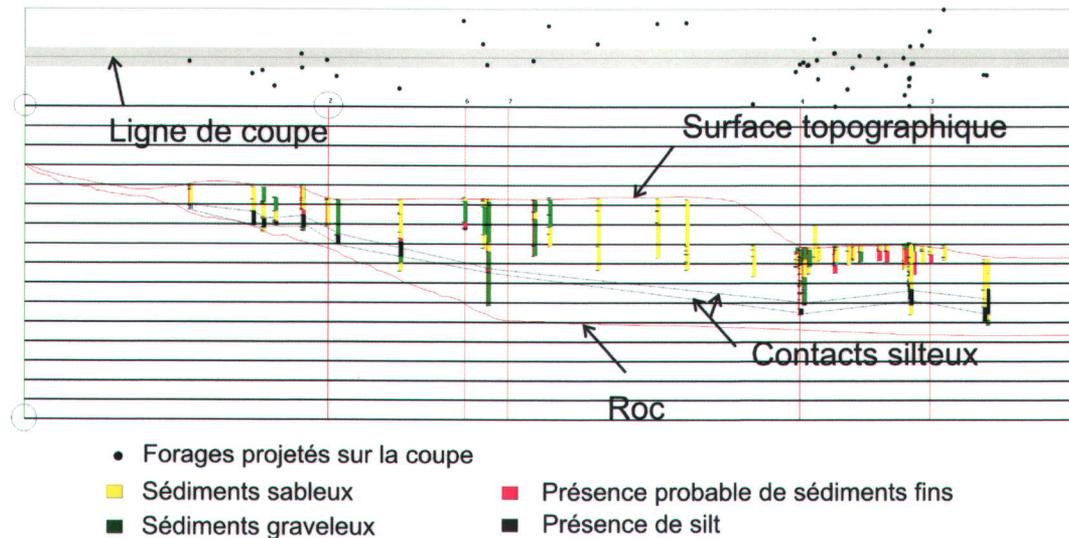


Figure 2.7 – Exemple de coupe stratigraphique Traverse©

2.4.3 Création des volumes des unités stratigraphiques

Une fois les surfaces de contrôle construites, les volumes de chaque unité sont générés. Une séquence stratigraphique est définie d'après la géologie et la mise en place des unités quaternaires. Six unités sont considérées pour la totalité du modèle en fonction des connaissances géologiques. Le modèle 3D obtenu par la méthode conventionnelle avec une exagération verticale de 5 est présentée à la figure 2.8 et en coupes à la figure 2.9. Ce modèle est formé de plus d'un million de cellules de même dimension (voxet). Les limites de cette modélisation ne tiennent pas en compte les limites hydrogéologiques, mais correspondent plutôt aux limites territoriales du secteur d'essais. Le choix de couleur des unités provient de la convention établie par la CGC-Québec pour les formations superficielles.

Les figures 2.8 et 2.9 montrent la présence d'alluvions des terrasses fluviales (At) d'épaisseur variant de 1 à 5 m dans le secteur sud-est du site et ayant pour seule formation voisine les sédiments deltaïques (Md). Ces derniers sont les plus présents sur le modèle et peuvent atteindre une épaisseur de près de 60 m. Le plus souvent, cette unité est scindée en deux par la présence de sédiments fins silteux prodeltaïques d'épaisseur variant de 1 à 15 m. Quant aux sédiments proglaciaires (Gx), on les retrouve surtout dans la portion sud-ouest du site et ils atteignent près de 30 m à l'ouest où ils affleurent.

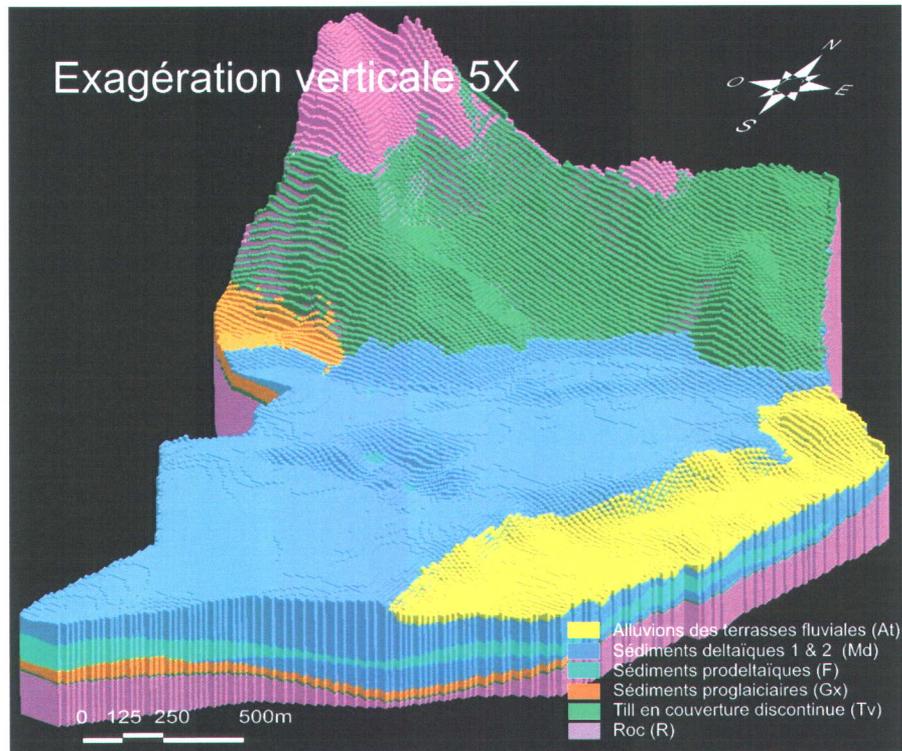


Figure 2.8 – Modèle géologique 3-D des formations superficielles

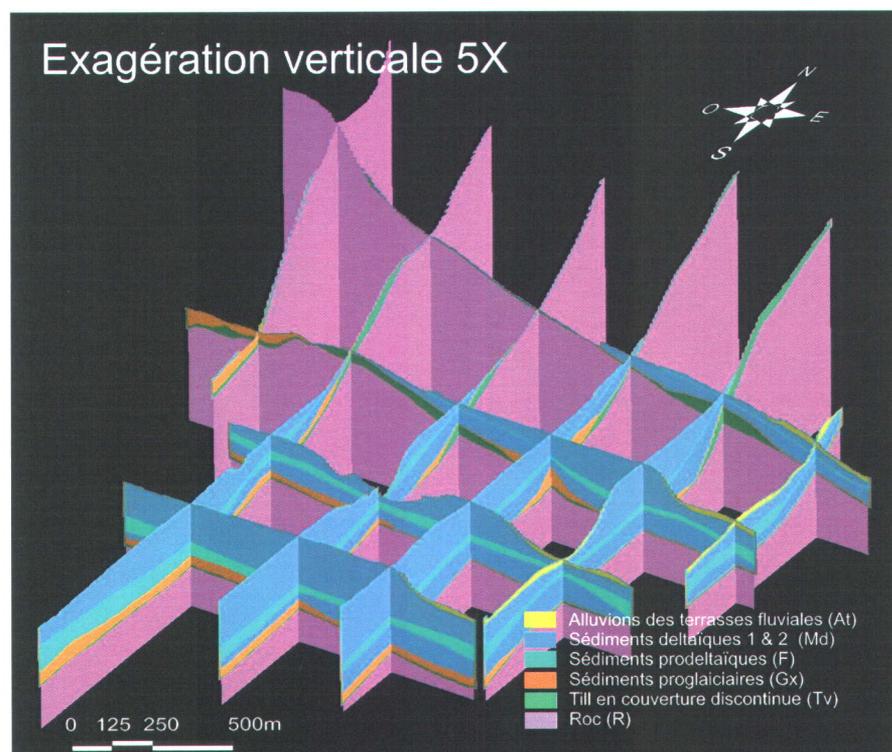


Figure 2.9 – Vue en coupes du modèle géologique 3-D des formations superficielles

Le modèle à cette étape du processus, bien que représentant la géologie du site, montre plusieurs lacunes :

- il est hautement dépendant du modélisateur ;
- si de nouvelles données sont acquises, leur intégration nécessite de reprendre tout le processus ;
- comme sa construction est basée sur l'interpolation de données de forages discontinues, la continuité des couches est souvent surestimée ;
- il est unique et ne permet donc pas d'évaluer l'incertitude de la modélisation.

L'utilisation de simulations géostatistiques pour la construction de multiples modèles équiprobables peut permettre de résoudre certains de ces problèmes. Le chapitre suivant décrit le processus d'application de telles méthodes à la zone d'étude.

Article 1 : Heterogeneity definition of a deltaic aquifer using multiple-point geostatistics and sequential Gaussian simulations

ABSTRACT

This paper presents a workflow to build multiple stochastic hydraulic conductivity numerical 3D models that handle the geological and hydrogeological heterogeneities. Direct and indirect field measurements are used as inputs in geostatistical simulations to reproduce large and small scale heterogeneities in a paleo-deltaic environment. Lithological information is associated to equivalent hydrogeological facies (hydrofacies) according to hydraulic properties. A multiple-point (MPG) algorithm is used to take account for the heterogeneous hydrofacies (HF) distribution while sequential Gaussian simulations (SGS) enable hydraulic conductivity heterogeneity reproduction within each HF.

RÉSUMÉ

Cet article présente une approche permettant la construction de modèles numériques 3D stochastiques représentatifs de l'hétérogénéité géologique et hydrogéologique du système à l'étude. Des simulations géostatistiques utilisant des mesures directes et indirectes sont utilisées pour reproduire l'hétérogénéité d'un environnement paléo-deltaïque à grande et petite échelles. L'information lithologique est classée en faciès hydrogéologiques (hydrofaciès) d'après les propriétés hydrauliques. Un algorithme multi-points est utilisé pour représenter les différents scénarios de la distribution hétérogène des hydrofaciès (HF). Différentes distributions de conductivité hydraulique sont alors attribuées à chacun des HF en utilisant des simulations séquentielles gaussiennes (SGS).

3.1 Introduction

Due to increasing anthropic activity and environmental concerns, industrialized countries have to deal more and more with contaminated sites and their effects on water resources (Freeze and Cherry, 1979). In order to manage the water resource in a sustainable way, the groundwater systems need to be characterized quantitatively. The understanding and forecasting of complex groundwater systems can only be done by numerical models (Domenico and Schwartz, 1998). To obtain an efficient groundwater flow and mass transport system, building a stratigraphic model is necessary to reproduce grain-size heterogeneities and hydraulic preferential paths (Cabello et al., 2007; Falivene et al., 2007). Indeed, heterogeneities in aquifer systems tend to control subsurface processes (De Marsily et al., 2005).

Paleo-deltaic environments show significant variations in stratigraphic facies continuity. In such systems, the hydraulic properties can vary within a few meters by orders of magnitude (Koltermann and Gorelick, 1996). Descriptive drilling information gives the knowledge on the nature of the sediments and the stratigraphic sequence. However, in a paleo-deltaic system, the lateral variation of geological units cannot be assessed adequately by connecting punctual hard data points. Moreover, this classical methodology has proven to be inefficient to reproduce a heterogeneous hydraulic conductivity distribution (Hubbard and Rubin, 2005).

The approach proposed in this paper uses geostatistical simulations, a method that is increasingly used in heterogeneous systems modelling, to generate multiple statistically equivalent high resolution geological facies models and to fill them with hydraulic conductivity properties (Falivene et al., 2007). Such simulations allow time-efficient and easily reproduced building of 3D hydrogeological models which are in agreement of the facies distribution and fit all the measured data.

3.1.1 Study area

The study site is located on Defence Research and Development Canada (DRDC-Valcartier) tests range about 30 km north-west of Quebec City in Valcartier, Qc. Since the end of World War II, the Canadian Forces have been using the area of the Valcartier Base for military research and development purposes. Figure 3.1 shows the location of the tests area in the Quebec City region. The site is bounded to the east by the Jacques-Cartier River at an elevation of about 160 masl (meters above sea level) and to the north-west by outcropping rock at more than 300 masl. The study area covers 6

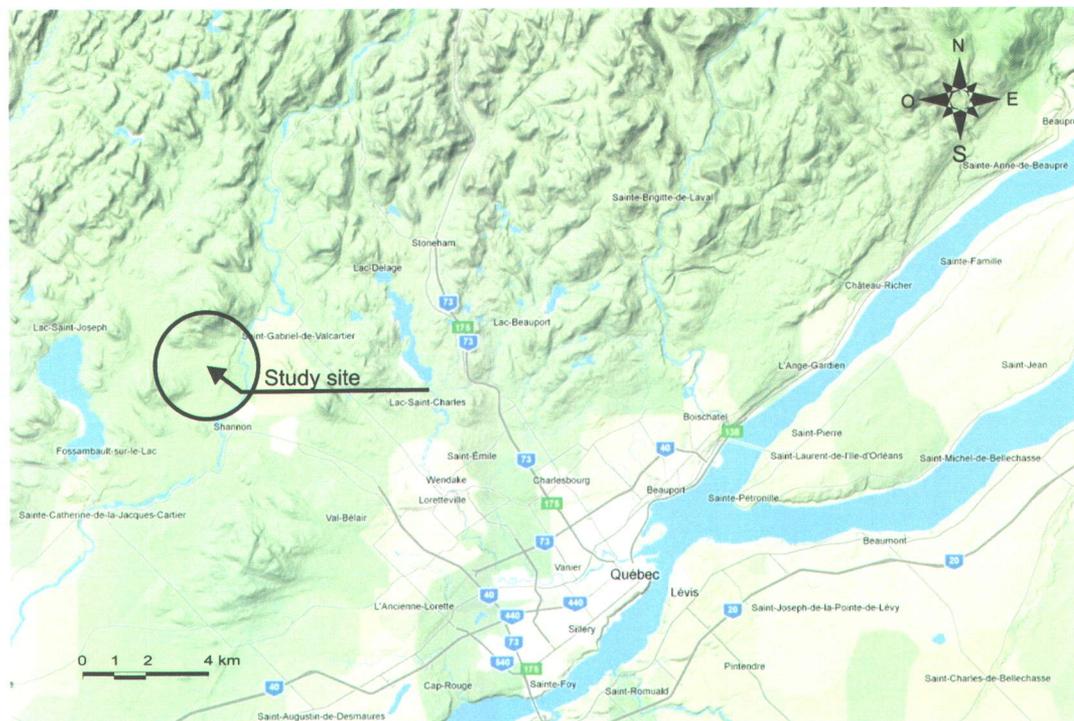


Figure 3.1 – *Study area location*

km² and its geology consists of quaternary deposits overlaying Canadian Shield gneiss. The system is made of glacial and deltaic sediments put in place by the Champlain Sea.

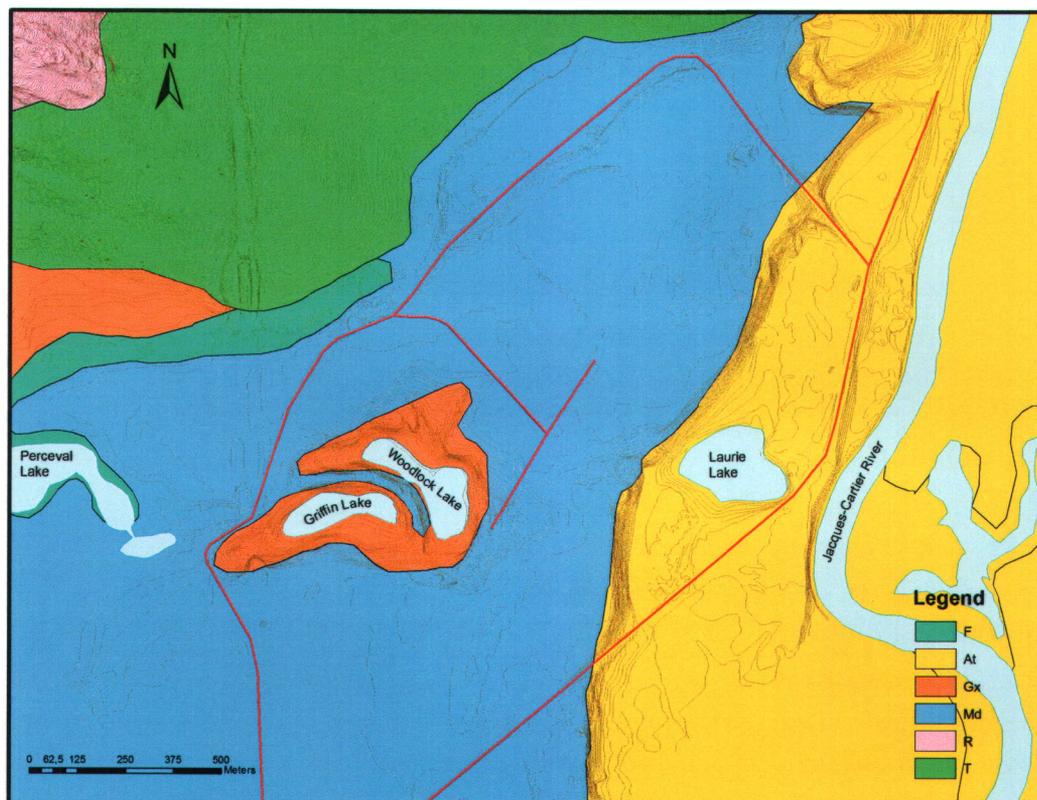
Surface geology maps (Michaud et al., 1999) at the studied site revealed the presence of 6 major geological units (Figure 3.2). Considering hydraulic properties of those units and using borehole information, hydrogeological facies (hydrofacies) could be defined. A relationship analog to the one described by Ouellon et al. (2008) for the Valcartier paleo-deltaic region was also helpful for borehole logs categorization. Table 3.1 summarize the HF assignation according to geological composition.

3.1.2 Study objectives

Conventional hydrogeological numerical modelling consists in interpolating by hand the different units intercepted at boreholes and assigning a unique mean hydraulic conductivity per geological unit. This approach is time consuming and, also, very user dependent. Also, because of these reasons, usually, only one smooth model is generated. Smoothing of the models implies that the heterogeneity of the ground and its properties are not reproduced leading to local over or under estimation of mass transport. The global effect of such smoothing cannot be estimated. Hence, the main objective of the

Table 3.1 – *Hydrofacies classification definition summary*

HF No.	Corresponding Stratigraphic Unit	Typical Geological Description
1	Bedrock (R)	Metamorphic igneous rocks from the Canadian Shield
2	Till (T)	Unsorted glacial sediment. Heterogeneous mix of clay, silt, sand, gravel and boulders
3	Glaciofluvial sediments (Gx)	Sand, gravel and boulders. Possible presence of till and/or diamictite
4	Fine sediments (F)	Silty sand, silt, silty clay, stratified
5	Deltaic sediments (Md)	Sand, gravely sand and gravel, stratified and sorted
6	Low terrace alluvium (At)	Sand, silty sand, gravely sand and gravel stratified, low presence of organic material

**Figure 3.2** – *Surface geology map modified from Michaud et al. (1999)*

study is to build multiple statistically equivalent 3D hydrogeological models that will help characterizing the aquifer heterogeneity and evaluate the uncertainty on groundwater flow and mass transport modelling. The steps involved in the heterogeneity definition process are exposed on figure 3.3.

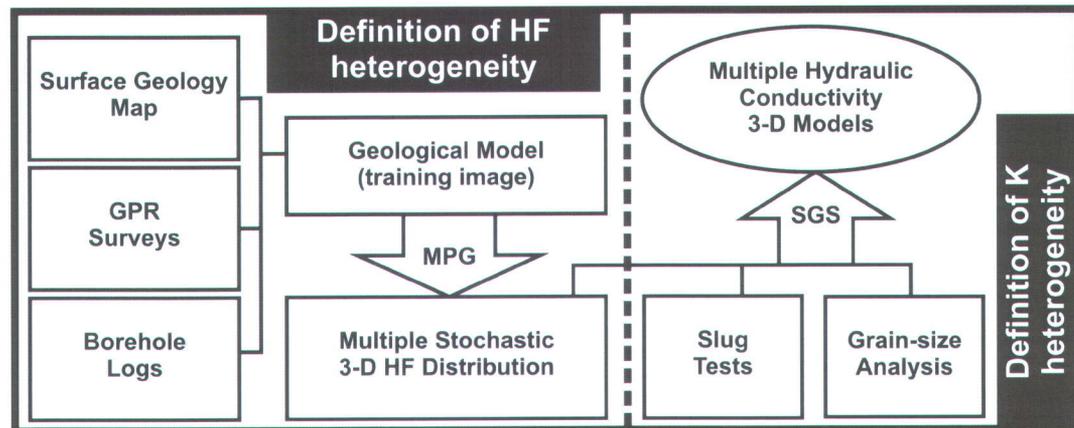


Figure 3.3 – Heterogeneity definition process leading to multiple 3D hydrogeological models

3.2 Definition of HF heterogeneity

Irregularly shaped heterogeneities that constitute paleo-deltaic systems yields to incapacity in using a classic horizontal layers geological model. Also, preferential flow paths may not be reproduced by conventional two-points geostatistical methods (Guardiano and Srivastava, 1993). When flow is governed by high conductivity channels, the use of multiple-point statistics has found to be efficient (Strebelle, 2002).

3.2.1 Theory of MPG

Multiple point geostatistics (MPG) is a pixel-based stochastic modelling method used to generate statistically equivalent multiple scenarios of categorical facies units (Guardiano and Srivastava, 1993; Strebelle, 2002). The process used by the algorithm is based on the sequential simulation method. Contrary to most simulation methods which use kriging and require the production of a variogram, MPG necessitates an initial model (training image) (Caers, 2002). The probability density function is directly obtained from the training image. It randomly visits every empty pixel of the model in order to assign a value based on the proximity and values of the neighbouring data. The simulator then reproduces in the simulated models the structures identified

in the training image (TI) as it automatically fit all the measured data (in our case by the drilling logs facies information). This geostatistical method is considered to be a structure-imitating process (Koltermann and Gorelick, 1996). No explicit constraint guarantees hard data histogram reproduction (Hu and Chugunova, 2008; Strebelle and Journel, 2000). Depending on training image reliability, the simulated values histogram can be quite different from the source one. The MPG algorithm used in our case is a homemade version designed by *Geovariances*© for the *Isatis*© software. This algorithm does not use a search tree to store the statistics from the TI as it is scanned for simulating each point.

The algorithm visits every cell to be simulated only once and assigns a value according to the neighbourhood and the structure identified in the training image. Once the simulated value is assigned to a cell it becomes a hard data conditioning the rest of the model not yet visited. The definition of the neighbourhood considered by the algorithm is crucial because it regulates the precision of the model as well as calculation time. Indeed, in MPG the more data are used in the neighbourhood, the more realistic are the simulated values. On the other hand, for a neighbourhood of n data which can take K categorical values, the simulator has to evaluate K^n possibilities, so there is a compromise to be made for calculation time.

3.2.2 Methodology

This section describes the processing of the raw data leading to the production of the 3D geological model used as a training image in multiple-point simulations. The full process of structuring and integrating field data to the MPG simulator is presented.

Available data

Since 1995, more than 120 boreholes have been drilled by consulting firms and *INRS-ETE* team in the studied area (figure 3.4). Boreholes logs have been assigned in the first place to an alphanumerical CGQ code developed by *Centre Géoscientifique de Québec* (Parent et al., 2003). This classification is based mainly on sediment origin and on its grain size. At first, these interpretations were used for the geological model production. Since the CGQ code is highly correlated to geological materials hydraulic characteristics, the data were then assigned a HF. The reinterpreted information was used in a second time as a hard-data input for the MPG simulations. Also, the surface geology map were considered as hard data to build the 3D geological model and for

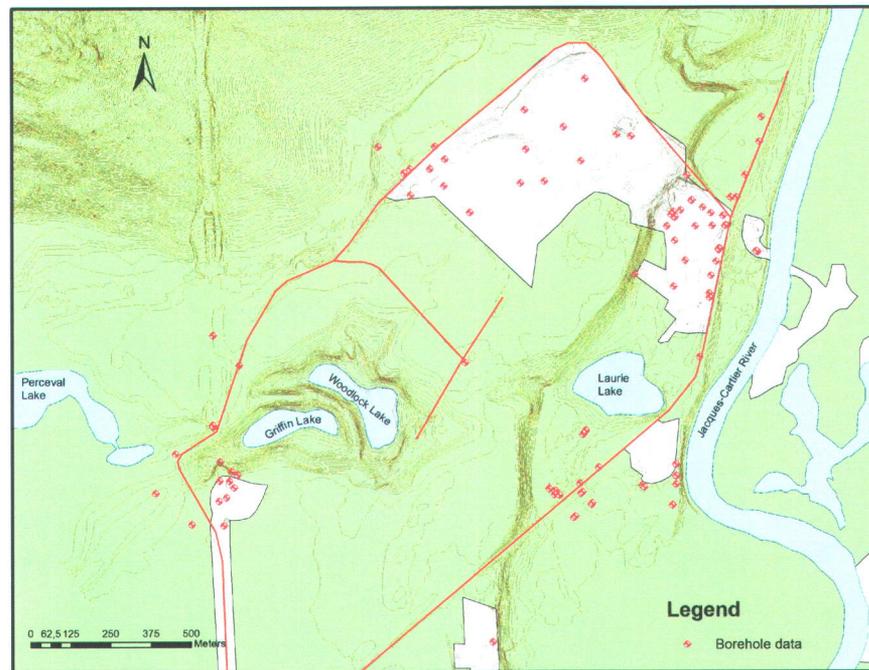


Figure 3.4 – Borehole location on the studied site

MPG simulations.

Twenty GPR profiles were made on the study site to increase the resolution of the stratigraphic contacts and hydraulic head. The system used is a pulse Ekko 100 with 50 MHz antennas and a 1000V transmitter (Sensors & softwares, 2001). Figure 3.5 shows the location of GPR profiles on the test site. The interpretation of the GPR profiles was made according to boreholes logs information and from piezometric surveys. The fine sediments contacts delineated by the GPR survey helped map facies distribution and continuity in the 3D geological model construction.

Conceptual geological model used as TI

The 3D geological model was built using the Gocad® software. This Paradigm® society product allows building and visualizing of stratigraphic units. Three-dimensional data points containing alphanumeric codes as geological unit property were gathered in the modelling software. This type of geological information is the main element to guide the geological model construction. Surface geology interpretation and time of deposition through main deltaic sedimentation processes were also greatly considered for this subsurface initial model shown on figure 3.6.

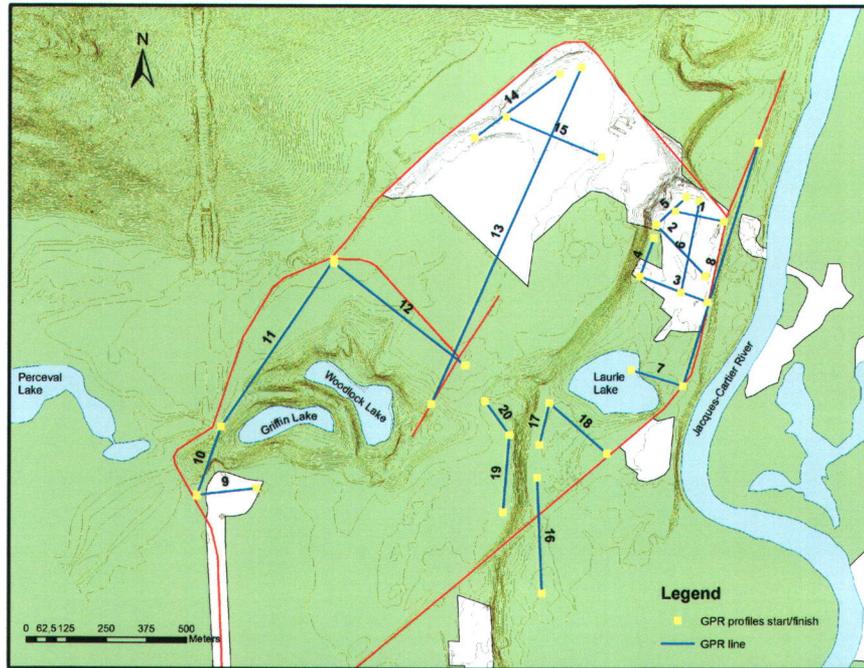


Figure 3.5 – GPR profiles location on the studied site

The model on figure 5 reveals the presence of low terrace alluviums (At) of thickness ranging from 1 to 5m in the south-east section of the studied site. Its only neighbour unit is the deltaic sediments (Md) which thickness can reach up to almost 60m in some areas. They are often split in 2 units by the presence of fine silty sediments (F) ranging from 1 to 15m in thickness. Glaciofluvial sediments (Gx) are mostly present in the south-west section and reach 30m thick where they outcrop. As reflected in the geological model, the till (T) unit was considered continuous over the whole modelling domain and represents the aquitard and the base of the hydrogeological system.

Although the proposed geological model represents an interesting *a priori* of the stratigraphic sequence, the continuity or discontinuity of geological units in this model cannot be assessed properly. The clustered and uneven borehole distribution on the studied site yields to major uncertainties regarding facies proportions and distributions for a model interpolated by hand. Thus, it is important to characterize units heterogeneity and their spatial variability in non-sampled areas of the studied site. Hence, the initial model is used as an input to generate multiple equivalent scenarios.

The geological model is constituted of more than a million cells of equal dimensions (*voxet*). The model boundaries do not represent actual hydrogeological boundaries, but corresponds to administrative limits of the tests range. In order to be used as a TI for the multiple-point simulations, each unit of the model was assigned a HF number according

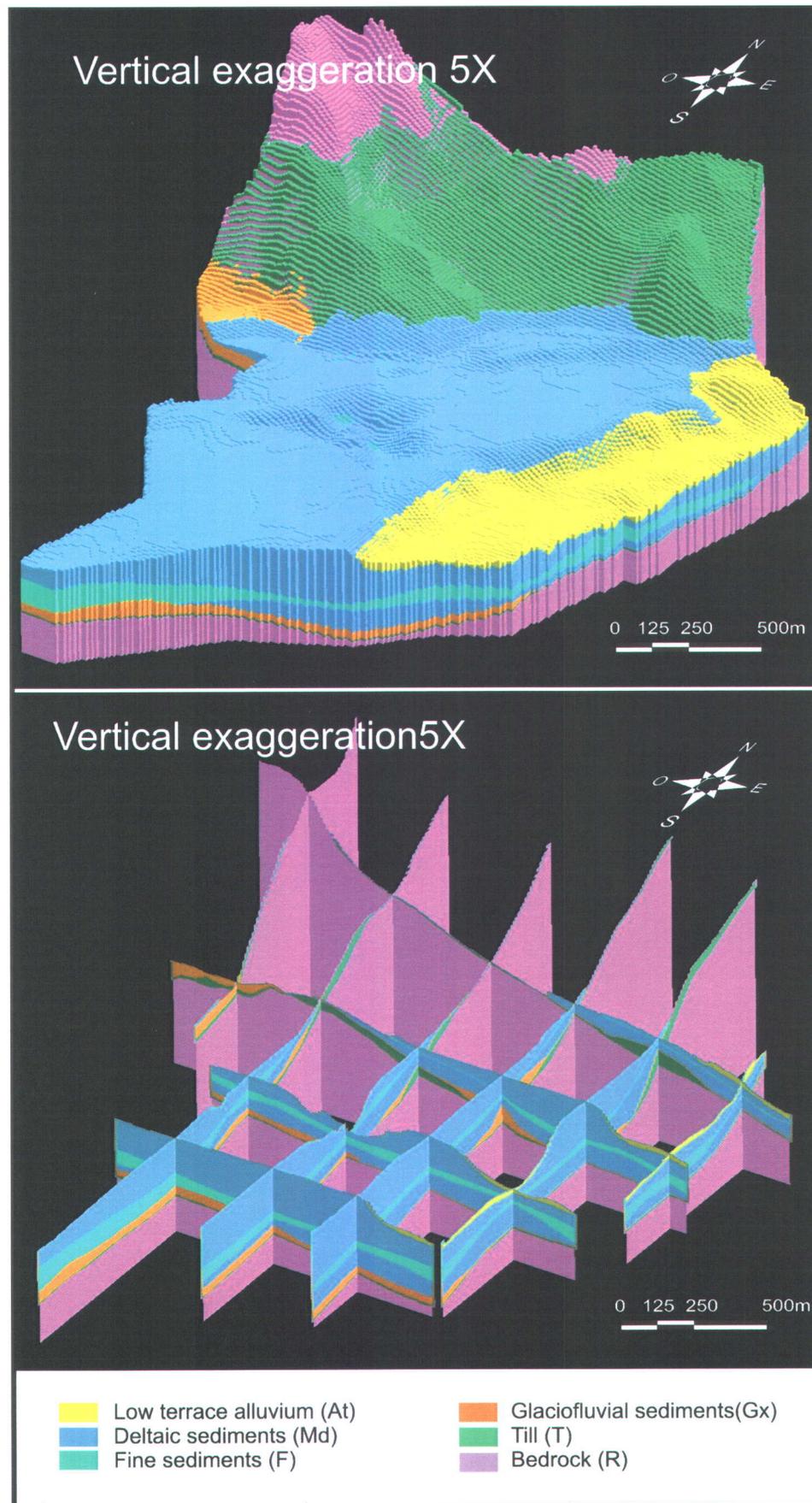


Figure 3.6 – 3D view of the geological model (top) and 2D cross-sections oriented to illustrate geological units distribution (bottom)

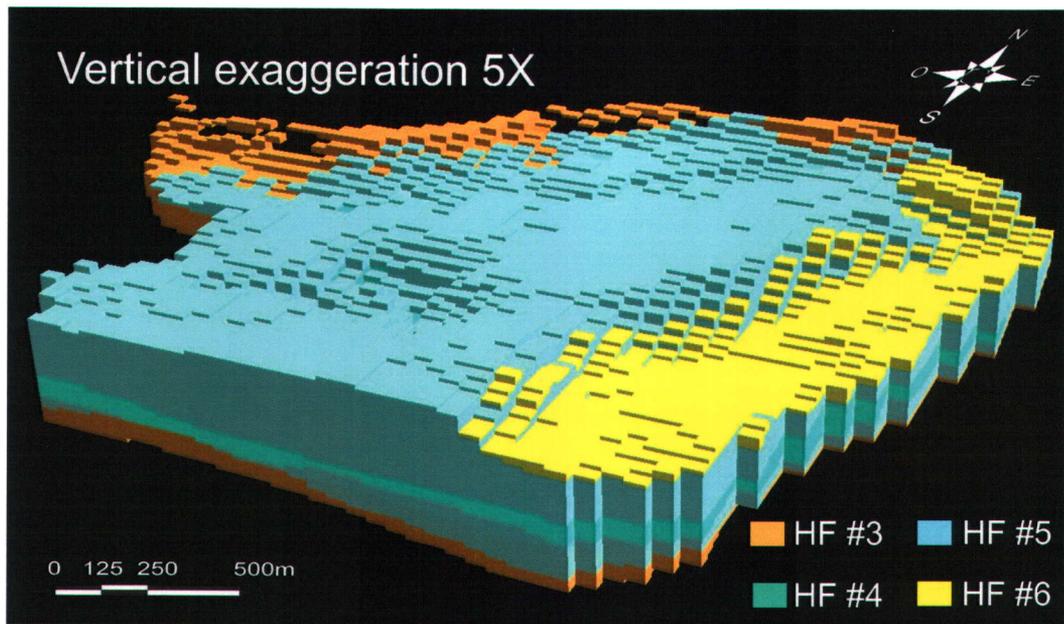


Figure 3.7 – 3D view of the TI used as an *a priori* for MPG simulations derived from the geological initial model (figure 3.6)

to its definition in table 3.1. Also, the boundaries were adjusted and the scale was brought to a level favouring computation time while not compromising measurements resolution. Figure 3.7 exposes the transfer needed for adequate TI parameters. It is to be noted that the till (T) and bedrock (R) units corresponding to HF #1 and #2 are not included in the stochastic modelisation as they are not part of the aquifer system modeled in this study.

3.2.3 HF simulated models

For an approximate computing time of 24h, 100 HF models were simulated. The simulations reproduce highly heterogeneous models as predicted by geologists. Moreover, the reproduction of HF #4 was very satisfying in terms of distribution realism compared to an unrealistic smooth model. Thus, multiple scenarios of lateral continuity are built for this HF. Figure 3.8 presents examples of MPG simulations.

Contrary to the continuous horizontal units proposed by the initial geological model, the simulated model presents discontinuous and highly heterogeneous distribution of prodeltaic sediments as expected in this kind of geological setting. All the models generated are statistically equiprobable and respect hard data i.e borehole descriptions categorized as HF. However, some scenarios were immediately rejected, not being geo-

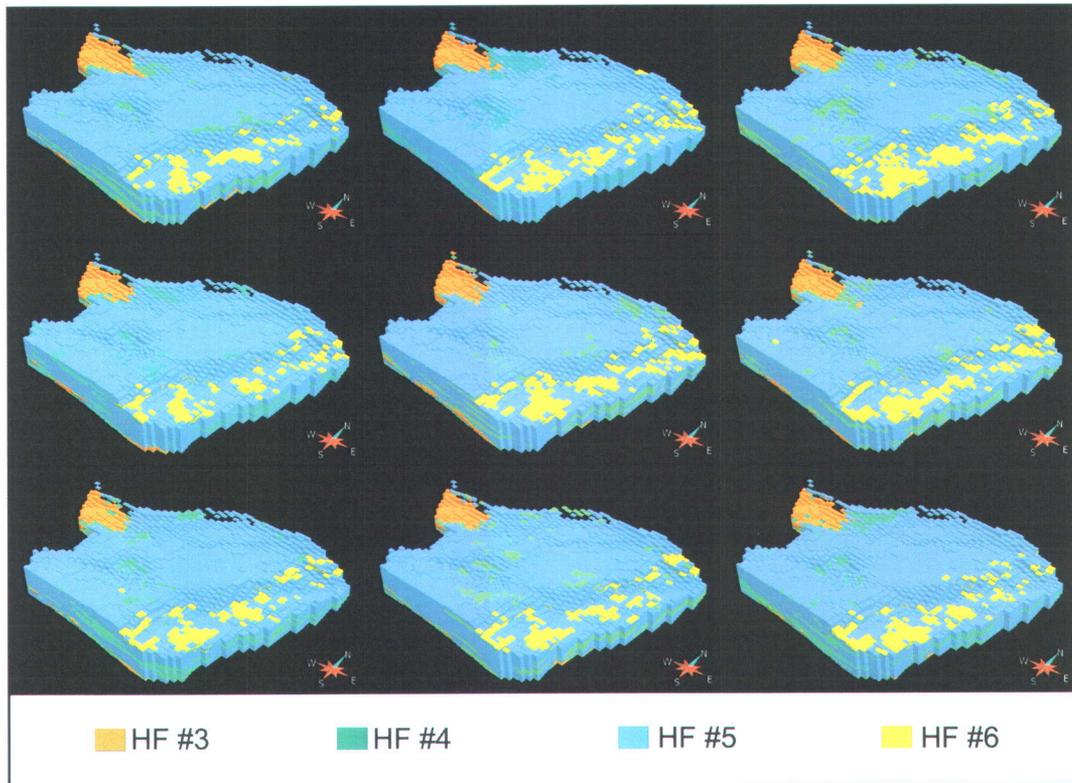


Figure 3.8 – Samples of MPG simulations

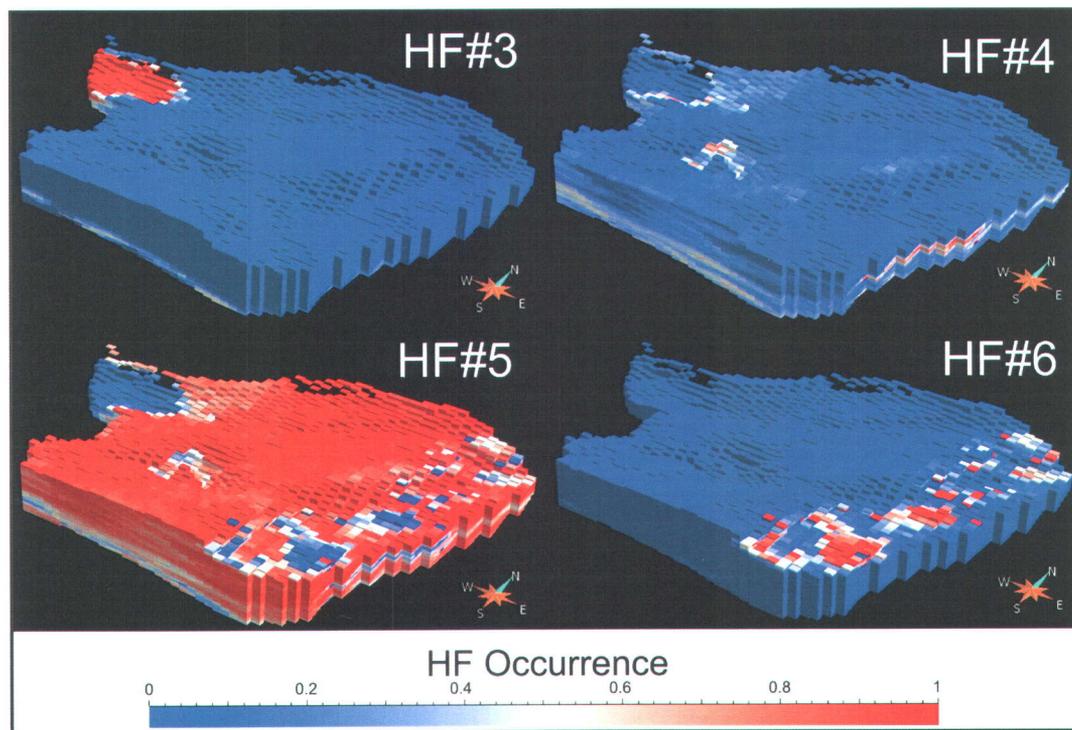


Figure 3.9 – Probability of occurrence for each HF simulated (1=100%)

logically acceptable (i.e not respecting the adequate stratigraphic sequence). Moreover, after assigning hydraulic conductivities to those models, their hydrogeological integrity will be tested in terms of groundwater flow plausibility. This is an important factor of the method where the models are geologically and hydrogeologically validated by quaternary geologists and flow simulations respectively. Figure 3.9 shows HF occurrence probability over the 100 simulations.

3.3 Definition of hydraulic conductivity (K) heterogeneity

The approach proposed in this paper aims to define 2 types of heterogeneity : geological as HF distribution and the one associated with hydraulic conductivity distribution within each facies. The preceding section presented the first one and the following the second. Here, every HF simulated models are assigned with multiple scenarios of hydraulic conductivity distribution according to their hydrogeological characteristics and using sequential Gaussian simulations (SGS). The large scale heterogeneity definition exposed the major trends of preferential flow paths. The small scale structure reproduction of hydraulic conductivity distribution has an important impact on dispersion through mass transport.

3.3.1 Theory of Sequential Gaussian Simulations (SGS)

In geology, SGS is the most common used simulation algorithm (Deutsch and Journel, 1992; Koltermann and Gorelick, 1996). It allows generation of continuous Gaussian realizations (Goovaerts, 1997; Journel and Huijbregts, 1978). Using a Gaussian probability density function (PDF), SGS assigns a simulated value for every cell of a grid, visiting it sequentially and through a random path. The PDF is determined by the mean and the conditional variability obtained from simple kriging using conditioning data, in our case, K measurements and previously simulated values. By definition, SGS reproduce hard-data histogram and variogram.

Table 3.2 – Summary of variography results for SGS

HF	Nugget	Nugget+sill	Range		
			X	Y	Z
#3	0.02	0.1906	113.759	113.759	0.1
#5	0.05	3.892	440.39	440.39	0.1
#6	0.05	3.892	440.39	440.39	0.1

3.3.2 Methodology

Conditional SGS requires hard-data (measured values). Hence, K data were integrated to the model. For the overall studied area, about 90 slug tests (Bouwer and Rice, 1976) results were available. The SGS process being independent for each HF, K measurements have to be assigned to the associated region (HF). Moreover, this type of simulation involving a kriging algorithm, variograms representing hard-data spatial structure has to be built for each HF. However, the uneven K measurements distribution over the whole studied area yields to inadequate characterization of HF #4 (fine sediments) due to lack of data (3) and to incapacity of building a proper variogram for HF #6. Thus, a choice was made to run unconditional SGS for HF #4, calibrated using a theoretical histogram representing typical values for a fine geological unit ranging from fine silty sand to argillaceous silt, corroborated with value from Ouellon et al. (2008). Although conditioning data belonging to HF #6 were used to generate conditional SGS in this region, parameters describing the spatial correlation of HF #5 were used. Numerous geological similarities between the two units enabled this analogy. Table 3.2 presents variography results and estimates. The base 10 logarithm of K was used to ensure hard data Gaussian distribution. Unconditional SGS being performed over HF #4 domain, a theoretical normal distribution was used with a log mean of -7.5 m/s and a log standard deviation of 0.4.

Moreover, for each HF, minimal and maximal boundaries were assigned. Those values were defined using available K data range, previous studies results in the area (Ouellon et al., 2008) and typical geological facies property range from each HF composition. Table 3.3 summarize the SGS boundaries for each HF.

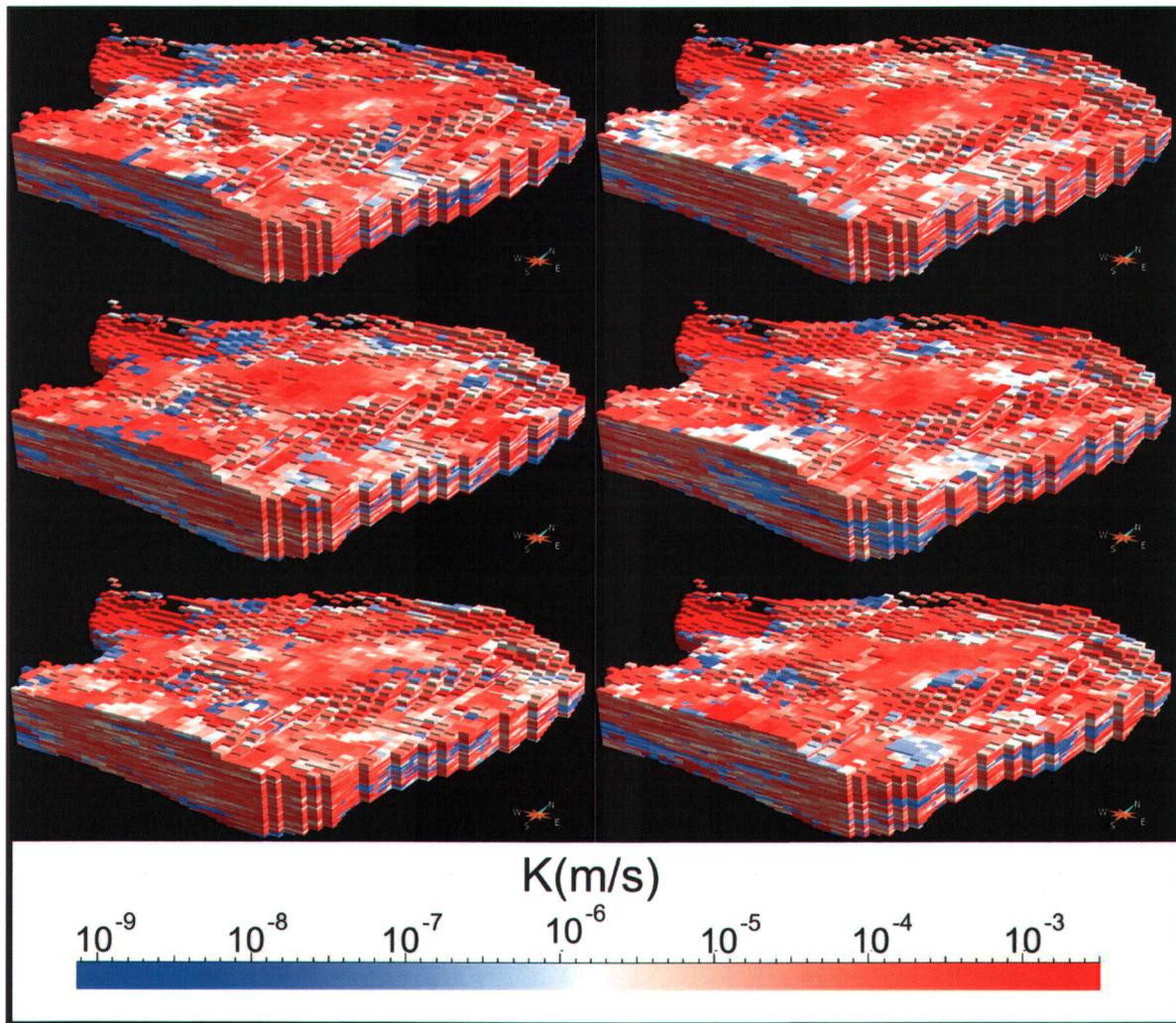
3.3.3 K simulated models

Thus, simulated hydraulic conductivity values are assigned to each HF following a predefined distribution characteristics of the HF characteristics and hard-data condi-

Table 3.3 – Summary of HF range for SGS

HF	K_{min} m/s	K_{max} m/s
#3	5×10^{-4}	5×10^{-3}
#4	5×10^{-9}	5×10^{-7}
#5	5×10^{-6}	5×10^{-4}
#6	1×10^{-7}	1×10^{-4}

tioning. For each HF simulated model, five different and equiprobable K distributions are assigned. Overall, 500 models of K were generated with a SGS algorithm. Figure 3.10 presents simulated models samples chosen over the 500 models.

**Figure 3.10** – Sample of SGS simulated K models

The K distributions presented in the simulated models are consistent with corres-

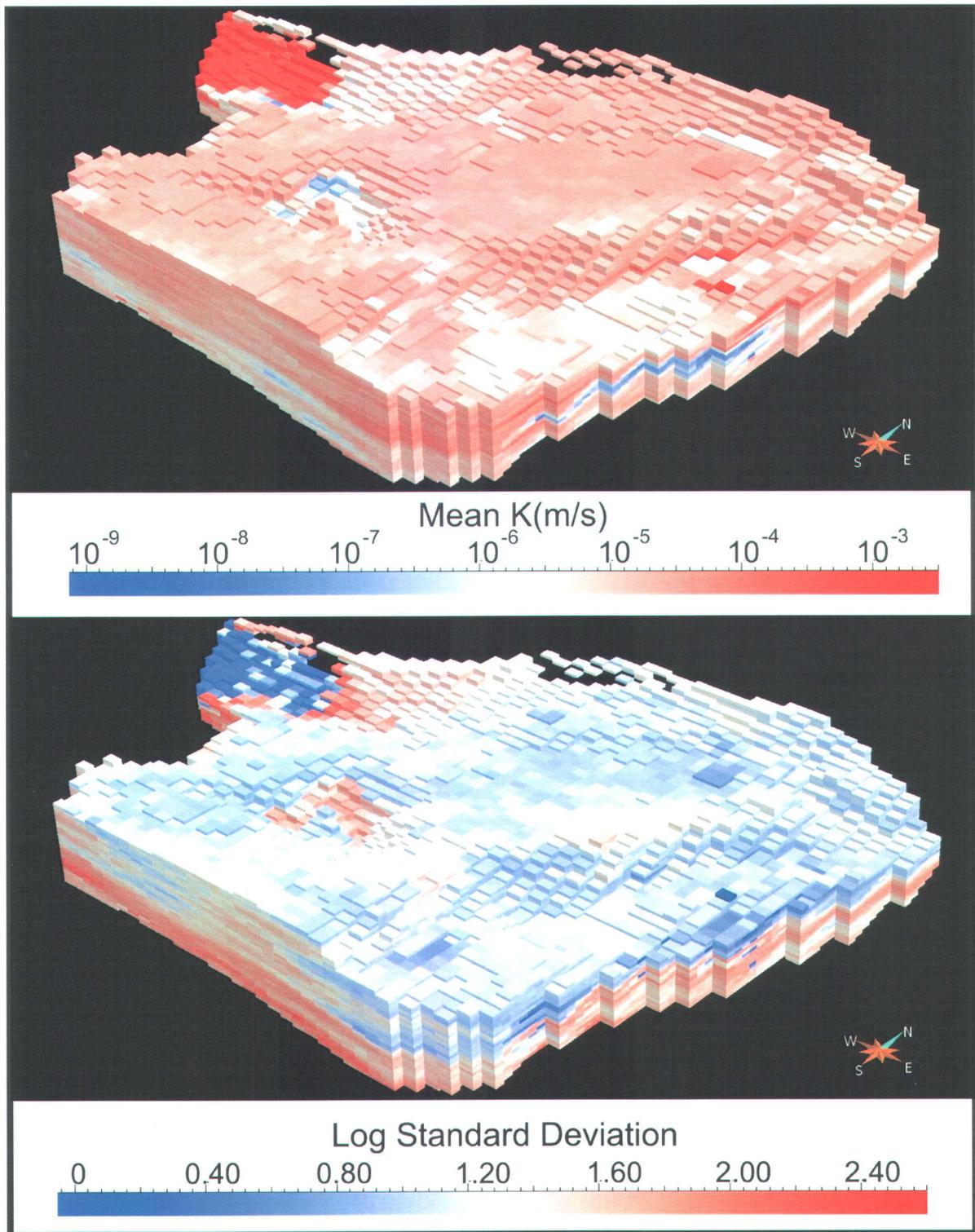


Figure 3.11 – Mean hydraulic conductivity model (top) and log standard deviation (bottom) obtained combining all the simulated K distribution

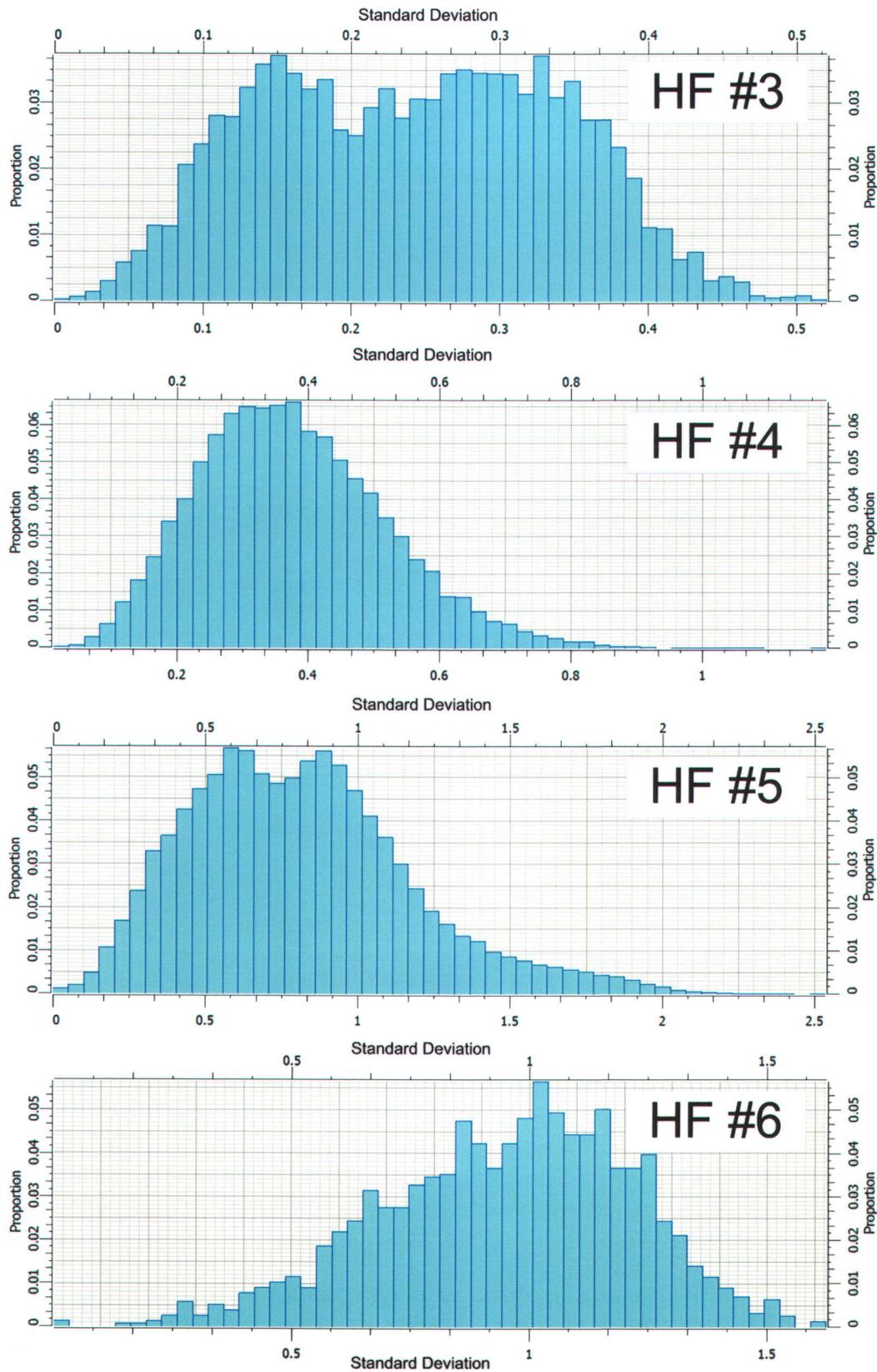


Figure 3.12 – Log standard deviation of simulated K models in one HF distribution scenario

ponding HF simulated models. Indeed, simulated models present different scenarios of the preferential flow paths (red) highly associated to HF #3 distribution. They also propose multiple low permeability lenses distribution scenarios corresponding to HF #4 presence. Combining the simulated hydraulic conductivity models over all the possible scenarios, a very smooth mean model is obtained and a relatively high log standard deviation is observed (figure 3.11).

The log standard deviation over the 500 simulated models is largely controlled by the variability over the simulated HF models. Hence, the high standard deviation zones are mostly observed at great depth where the presence of HF hard data is less important. In opposition, standard deviation in areas corresponding to ground surface is less important as a lot of HF hard data are available. Indeed, surface geology map information provide those conditioning data. Thus, the variability of hydraulic conductivity at model ground surface is solely associated to SGS simulations of K.

To take into account the true variability of the K simulated models generated with SGS, the standard deviation of K simulated values for each simulated HF has to be examined. Figure 3.12 shows a relevant example. The histogram of HF #3 revealed the tight simulated values window allowed. The distribution for HF #4 is relevant of the theoretical *a priori* running unconditional SGS. For HF #5 and #6, the challenge to further characterize the heterogeneity of those facies yields to relatively high variability of hydraulic conductivity distribution. The importance of HF #5 3D volume combined to scattered and small range hard data also promote high variability.

Variability related graphs expose a certain incapacity to point out and define precisely the heterogeneous system using only one model. Some simulated values in HF #5 can be as far apart from the mean model of K as 2 orders of magnitude. Moreover, these values get even bigger as the facies heterogeneity is considered. Hence, a unique model might well be far away from reality by orders of magnitude, leading to groundwater flow modelling errors and most importantly to misled mass transport characterization.

Conclusion

Overall, 500 equiprobable simulated hydraulic conductivity 3D models were built. HF models were generated using borehole descriptions, an initial geological model and MPG. Simulated values of K were assigned to each simulated HF using K punctual measurements and SGS. The geological model construction was the most time-consuming step through the whole process.

The multiple-point geostatistics algorithm proved to be an adequate pixel-based tool to define deltaic systems heterogeneity. Simulated models built for the studied area help generating multiple scenarios of preferential flow paths in this sedimentary environment. The surface geology map is respected by the simulated models as well as borehole conditioning data. MPG are time-efficient and do not require the production of indicator variogram (Chilès and Delfiner, 1999). However, a training image representative of the geology in place must be made.

Sequential Gaussian simulations were very effective in terms of assigning heterogeneous hydraulic conductivity distribution to HF. It uses a straight-forward approach and it is time efficient. However, the 3D variogram production for K hard-data was very challenging. In fact, the uneven measurements distribution through HF generated fuzzy and irregular experimental variograms and theoretical model fitting issues.

Although the simulated K models generated are realistic and fit measured data, they tend to show high variability causing the modelization to be highly dependent to the number of realizations. Moreover, hydraulic conductivity field measurements resolution and integrity yield to important modelling uncertainties. Improvements of the workflow presented in this study could imply the extended use of indirect measurements (geophysics) correlated with hydraulic conductivity.

The production of multiple scenarios gives rapidly an inventory of possible solutions that can be expected from the measured data and the geological training image. The validation and the choice of the most appropriate models among all the generated ones will be assessed through the mass transport and flow modelling on every simulated model. The aspect of transport uncertainty caused by geological and hydrogeological modelling uncertainty is crucial in a global warming era for decision makers who have to protect and manage the water resource. For example, this approach will yield to probability map to overpass a given contamination thresholds.

Acknowledgements

The authors would like to acknowledge the contribution of Lise Lamarche and also the help of Marie-Catherine Poulin-Talbot for data and knowledge transfer of the studied area. The support of Ministry of National Defence for research funding and the collaboration of Nathalie Roy from DRDC-Valcartier are also gratefully acknowledged.

Article 2 : A probabilistic approach for mass transport characterization in a heterogeneous aquifer system

ABSTRACT

Classical hydrogeological modelling techniques using deterministic approaches to characterize sub-surface processes neglect the effect of the heterogeneity of the groundwater system. Consequently, such methods yield to over or underestimation of mass transport in heterogeneous areas. To assess for heterogeneity of these systems and to provide tools to evaluate uncertainties in aquifer management, geostatistical simulations were used on a test area of 6 km² located about 20 km north-west of Quebec city. Hydrofacies (HF) distribution scenarios were produced using multiple-point geostatistics and then filled with hydraulic conductivities (K). Integrating the 3D K models to a hydrogeological model, multiple mass transport scenarios were built assuming a constant source zone over 20 years. The different mass concentration values obtained from mass transport simulations were compared to simulation results for a mean K model. Transport simulations for the mean K model show underestimation of contaminant travel times and amplitudes probably caused by neglecting preferential flow paths effect.

RÉSUMÉ

Les techniques classiques de modélisation hydrogéologique utilisant des approches déterministes pour caractériser les processus d'écoulement de l'eau souterraine et du transport de masse dans l'eau souterraine négligent par construction, l'effet de l'hétérogénéité géologique et hydraulique. Ainsi, ces méthodes peuvent conduire à une sur ou sous-estimation du transport de contaminants dans les régions sensibles. Dans le but de

développer une méthodologie pour la construction de modèles hydrogéologiques dans les systèmes hétérogènes, une méthode de modélisation par approche géostatistique a été testée sur un site de 6 km² situé à 20 km au nord-ouest de la ville de Québec. Plusieurs scénarios de distributions des hydrofaciès (HF) sur le site ont été produits à l'aide de simulation multi-points. Ensuite, une distribution de valeurs simulées de conductivité hydraulique (K) a été intégrée à chacun des HF de ces modèles. Les modèles 3D de K ont finalement été introduits dans un modèle hydrogéologique et ont servi à produire plusieurs scénarios de transport de contaminants pour une source constante sur une période de 20 ans. Les différents résultats issus de ces simulations ont pu être comparés à un modèle de K moyen. Le modèle moyen semble négliger l'effet des chemins préférentiels d'écoulement entraînant une sous-estimation probable du transport de contaminants.

4.1 Introduction

Over the past few decades, environmental awareness has significantly increased in industrial countries. An effort has been made to evaluate the impacts of anthropogenic activity on receptors such as surface and ground waters. Following this idea, a research interest has grown to find ways to model and quantify contaminant transport through porous media on sensitive environmental sites. Thus, numerical modelling in such areas has proven to be an important and efficient tool to quantitatively define such processes.

In order to build realistic models, numerous studies ([De Marsily et al., 2005](#); [Koltermann and Gorelick, 1996](#)) have pointed out the need to characterize subsurface heterogeneity. Indeed, in highly heterogeneous systems such as paleo-deltaic environments, groundwater flow and mass transport are mainly controlled by the distribution and connectivity of high hydraulic conductivity preferential flow paths and low permeability units. Therefore, traditional geological facies model construction consisting in building stratigraphic units by connecting punctual data points cannot take account for different possibilities of pattern connectivity for high and low permeability media. Moreover, this type of smooth model assigns a constant hydraulic conductivity (K) value for an entire geological unit. Doing so, maximal and minimal values are not reproduced and groundwater flow and mass transport processes can be under or over estimated leading to inappropriate management decision for the water resource.

To avoid costly simplifications, geostatistical simulations are increasingly used in heterogeneous aquifer modelling. This method enables time efficient construction of multiple statistically equivalent high resolution hydrogeological facies model and K distributions.

Different varieties of geostatistical simulations were described in previous papers, [Goovaerts \(1997\)](#) presents a review of the different approaches and algorithms. To model complex geological structures such as paleo-deltaic systems, statistics using two-point correlation such as indicator or Gaussian truncated simulation techniques poorly reproduced specific geometries [Strebelle \(2002\)](#). To achieve the reproduction of this type of systems, multiple-point geostatistics (MPG) ([Guardiano and Srivastava, 1993](#); [Hu and Chuginova, 2008](#)) infer simulated values reproducing patterns from training images ([Caers, 2002](#)).

In this paper, we investigate the possibility of using MPG to define hydrofacies ([Fleckenstein and Fogg, 2008](#); [Ouillon et al., 2008](#)) distribution heterogeneity. The simulated hydrofacies (HF) scenarios are subsequently filled with K distributions using a standard Sequential Gaussian algorithm ([Journel and Huijbregts, 1978](#)). The effect of heterogeneity on the multiple models is then assessed on groundwater flow and mass transport simulations. Analog methodologies using truncated plurigaussian simulations can be found in [Mariethoz et al. \(2009\)](#) and for a 2D field in [Frei et al. \(2009\)](#).

4.2 Study area description

The test area is located about 30 km north-west of Quebec City, Canada in the Valcartier region. Defence Research and Development Canada (DRDC-Canada) and the Canadian Military Forces have been using this 6 km² site since World War II for training, research and testing purposes. The studied site, shown on figure [4.1](#), is bounded to the east by the Jacques-Cartier River at an elevation of about 160 masl (meters above sea level) and to the north-west by outcropping rock at more than 300 masl.

4.2.1 Available data

Over the past 20 years, numerous environmental studies using "classical" approaches have been conducted on the test area. Consequently, a lot of direct data are available including borehole descriptions, saturated hydraulic conductivity values from slug tests and piezometric surveys. At the beginning of the study, borehole descriptions were assigned a grain size code ([Parent et al., 2003](#)) developed by CGQ (*Centre Géoscientifique du Québec*). This categorization allowed a better understanding of the deposition processes and eventually leads to the construction of a geological model. Furthermore, the



Figure 4.1 – Study area location

geological codes were grouped in facies relevant of hydraulic properties of the material (hydrofacies) according to related measured hydraulic conductivities. This classification enables to build geological to hydrogeological linked models (Ritzi et al., 1995).

4.2.2 Geological and hydrogeological context

Surface geology interpretations (Michaud et al., 1999) at the studied site revealed the presence of 6 major geological units (Figure 3.2). Considering hydraulic properties of those units and using borehole information, hydrogeological facies (hydrofacies) could be defined. A relationship analog to the one described by Ouellon et al. (2008) for the Valcartier paleo-deltaic region was also helpful for borehole logs categorization. Table 4.1 summarize the HF assignation according to geological composition.

Previous studies aiming hydrogeological characterization (review presented in Poulin-Talbot et al. (2007)) revealed the presence of perched water table in the north-western part of the test area. This system flows through deltaic sands (Md) and suggest that the main lower aquifer is confined in some areas by a layer of prodeltaic silt (F). The main aquifer flows through glaciofluvial (Gx) and deltaic (Md) sediments. The system aquitard is a base till (T) considered to be impervious and continuous. Figure 4.2 presents

Table 4.1 – *Hydrofacies classification definition summary*

HF No.	Corresponding Stratigraphic Unit	Typical Geological Description
1	Bedrock (R)	Metamorphic igneous rocks from the Canadian Shield
2	Till (T)	Unsorted glacial sediment. Heterogeneous mix of clay, silt, sand, gravel and boulders
3	Glaciofluvial sediments (Gx)	Sand, gravel and boulders. Possible presence of till and/or diamictite
4	Fine sediments (F)	Silty sand, silt, silty clay, stratified
5	Deltaic sediments (Md)	Sand, gravely sand and gravel, stratified and sorted
6	Low terrace alluvium (At)	Sand, silty sand, gravely sand and gravel stratified, low presence of organic material

the initial geological model and groundwater flow controlling units.

Water exchanges between ground and surface water have also been characterized in previous studies (Martel et al., 2009). The hydrogeological conceptual model is shown through cross-sections AA' and BB' on figures 4.3 and 4.4. They expose the conceptual lateral variation of the perched water table extent. They also show that the lakes of the test area are directly connected with the groundwater system. Precipitations on the deltaic sands of the studied site largely contribute to groundwater recharge through direct infiltration. However, on the north-western most section, runoff is the dominant process on surface till (T) and bedrock (R). The runoff water infiltrates further down on sandy areas. Less permeable silty lenses in this area create a local perched water table. The hydrogeological model proposing that the till (T) unit is continuous and impervious, water exchanges between the sedimentary aquifer and a possible fractured bedrock system are neglected.

4.3 Heterogeneity definition approach

The aim of the study being to quantify the effect of heterogeneity on mass transport variability, this section presents an overview of the process to build multiple statistically

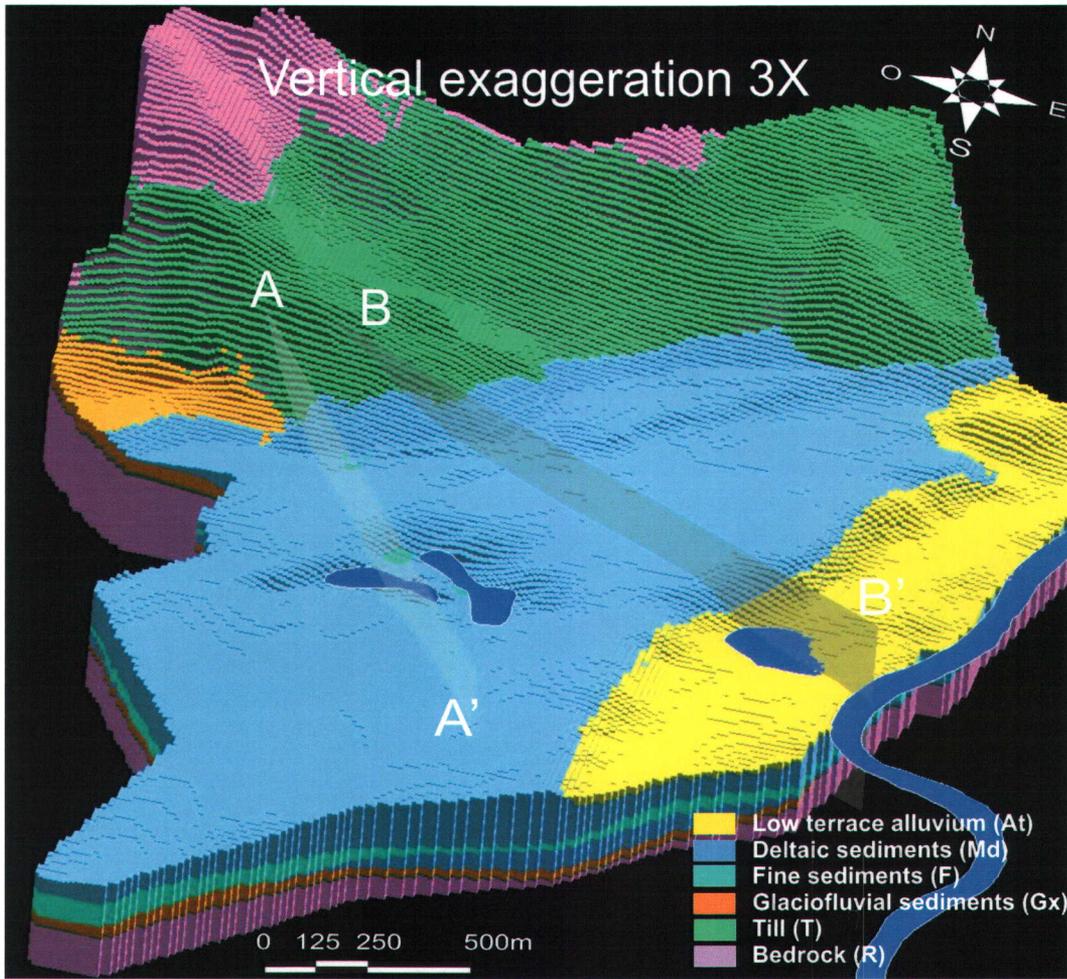


Figure 4.2 – Geological initial model and AA' and BB' 2D cross-sections localisation

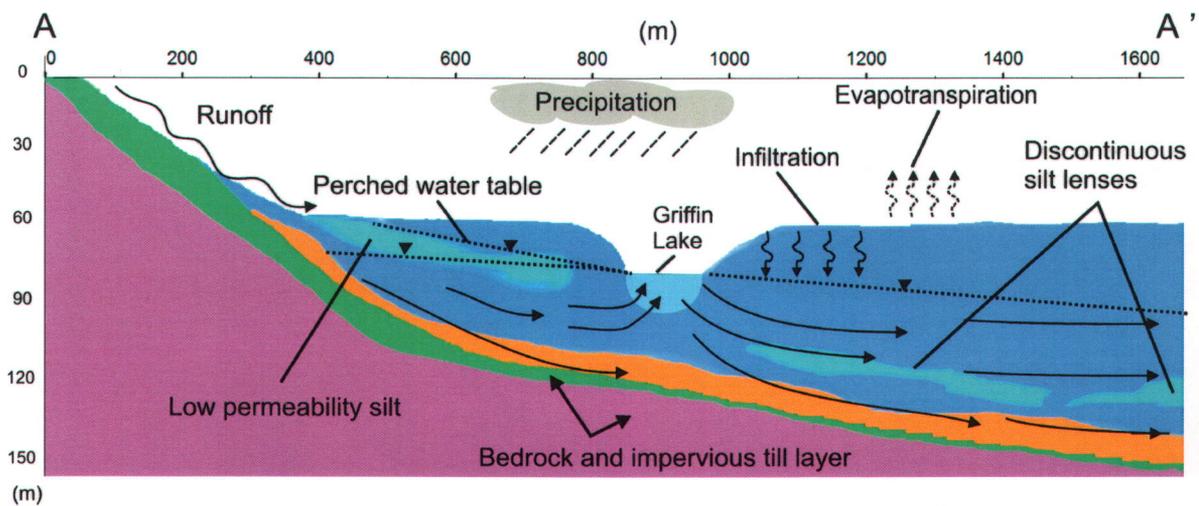


Figure 4.3 – 2D view of the hydrogeological conceptual model in the Griffin lake area (AA')

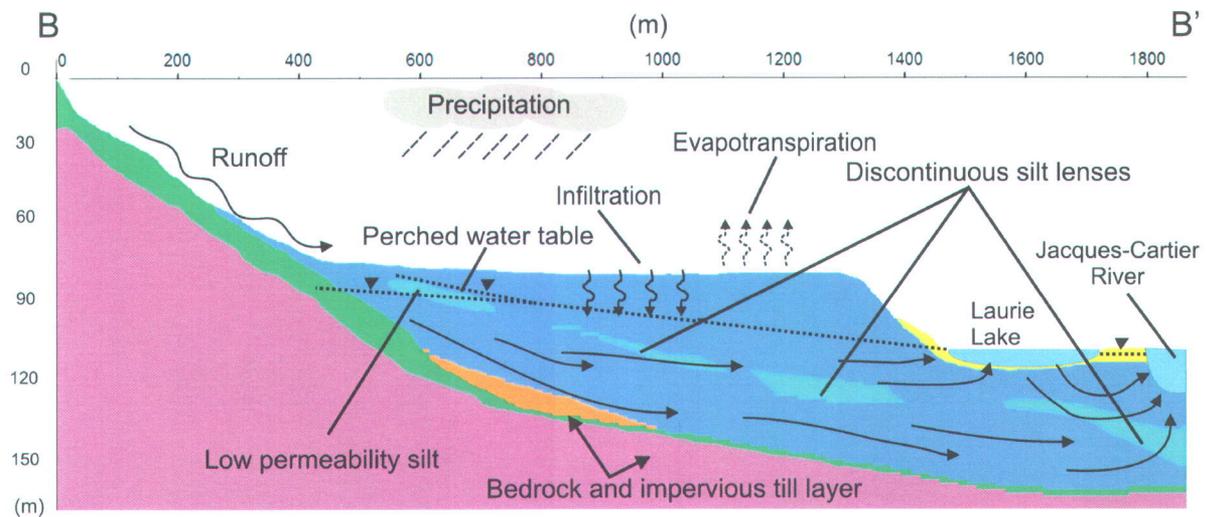


Figure 4.4 – 2D view of the hydrogeological conceptual model in the Laurie lake area and at the Jacques-Cartier river (BB')

equivalent hydrogeological models. The approach is conducted in two steps as geological heterogeneity is characterized and then facies are populated with different hydraulic conductivity distributions. It is flexible and allows modelling structures at different scales (Mariethoz et al., 2009).

4.3.1 HF distribution simulations

A multiple-point algorithm (Guardiano and Srivastava, 1993) was used to simulate different geological sedimentary environments. This geostatistical method uses categorical data. The HF classification presented in the previous section was used. The method also requires a conceptual model (*training image*) (Caers, 2002) instead of a variogram. The multiple-point geostatistics is known to enable aquifer heterogeneity patterns reproduction (Boucher, 2008).

For an approximate computing time of 24h, 100 HF models were simulated. The total number of simulations was chosen considering a reasonable computing time and an adequate variability characterization. The results of those simulations reproduce highly heterogeneous models as predicted by geologists. Moreover, the reproduction of HF #4 was very satisfying in terms of distribution realism compared to an unrealistic smooth model. Figure 4.5 presents examples of MPG simulations results.

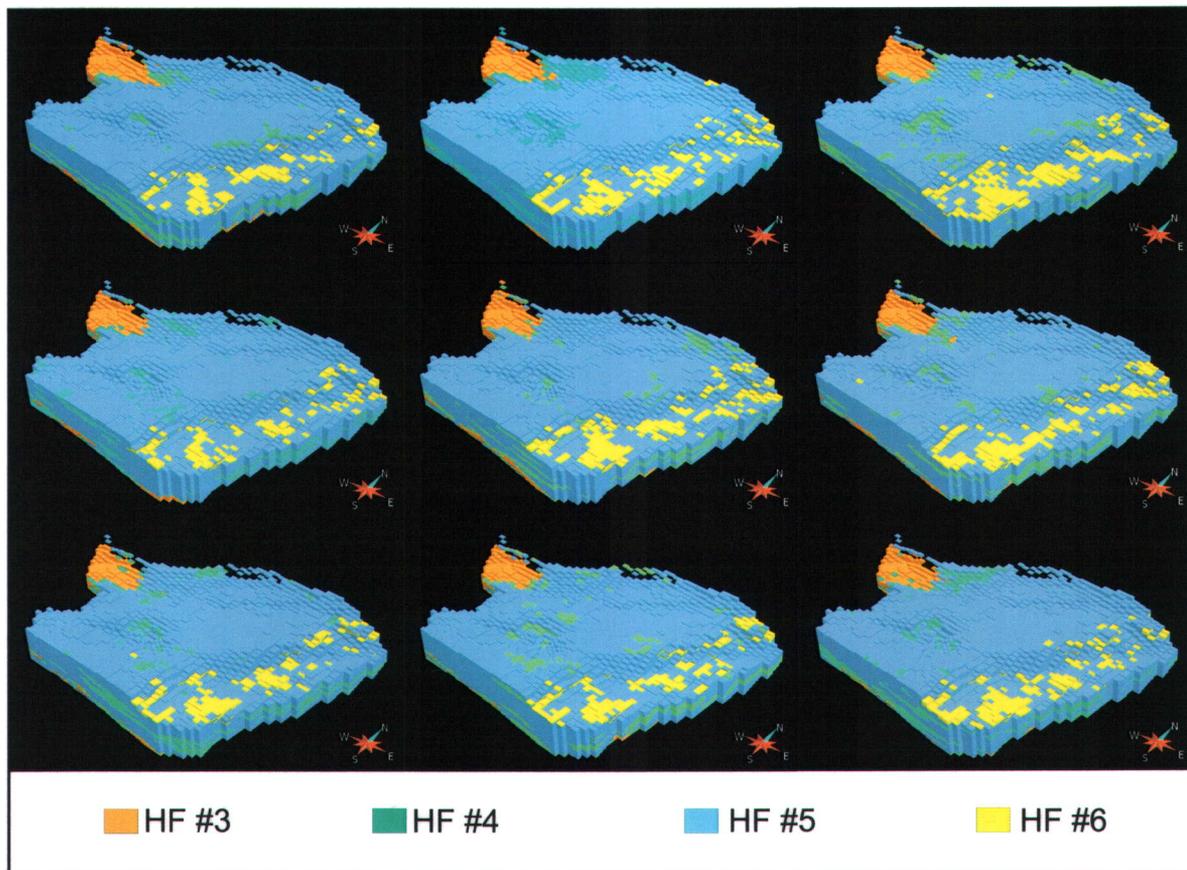


Figure 4.5 – *Samples of MPG simulation results*

4.3.2 K distribution simulations

Every HF simulated models are assigned with multiple scenarios of hydraulic conductivity distribution according to their hydrogeological characteristics and using sequential Gaussian simulations (SGS). The large scale heterogeneity definition exposed the major trends of preferential flow paths. The small scale structure reproduction of hydraulic conductivity distribution has an important impact on dispersion through mass transport.

Thus, simulated hydraulic conductivity values are assigned to each HF following a predefined distribution specific to the HF characteristics and hard-data conditioning. For each HF simulated model, five different and equiprobable K distributions are assigned. Overall, 500 models of K were generated with a SGS algorithm. Figure 4.6 presents simulated models samples.

The K distributions presented in the simulated models are consistent with corresponding HF simulated models. Indeed, the bright red areas associated with high

permeability zones are mainly coming from K simulated in HF #3. On the other hand, dark blue zones point out mostly to HF #4.

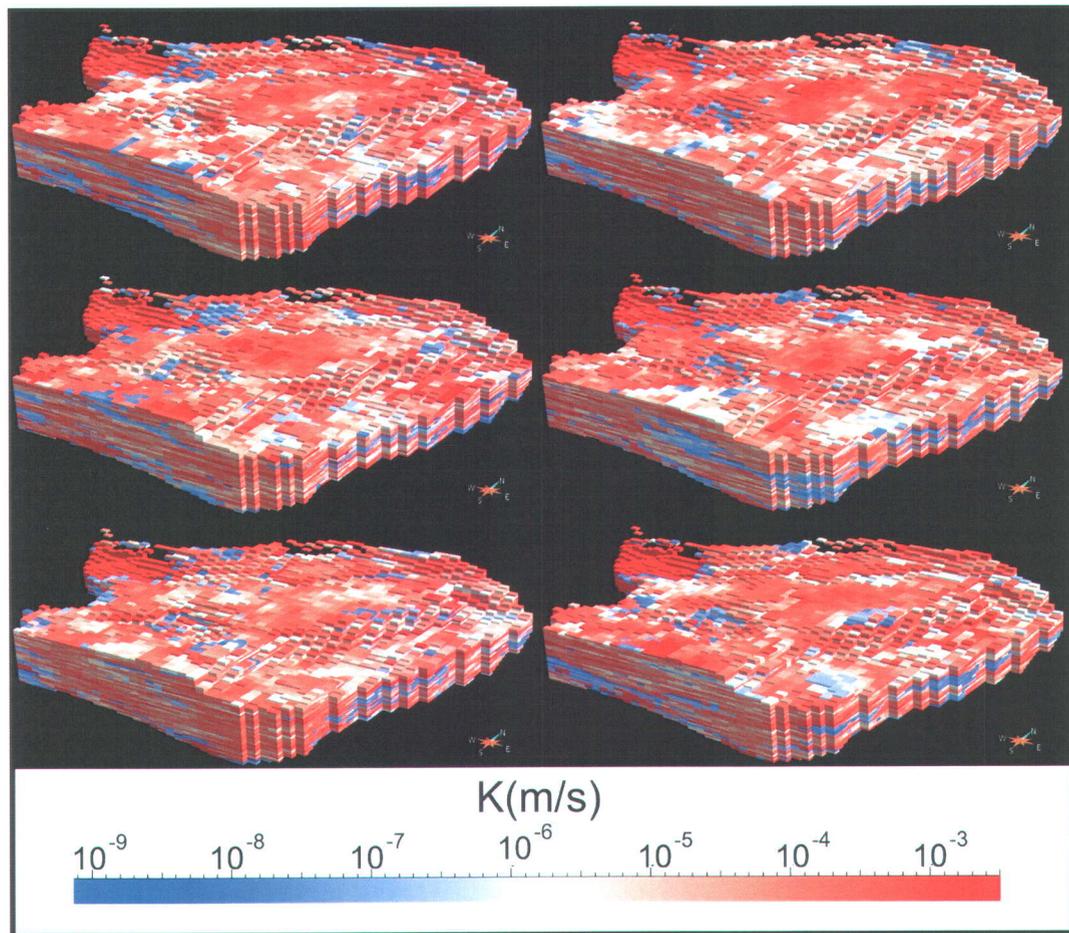


Figure 4.6 – Sample of SGS simulated K models

4.4 Groundwater flow modelling

In order to obtain a groundwater mass transport model, the groundwater flow model has to be well defined and calibrated with realistic properties and characteristics. The following section describes the specifications of this model and its calibration.

4.4.1 Model calibration

FEFLOW 5.4 software (Diersch, 2002) was used for groundwater flow and mass transport modelling. The choice of a finite element flow model is supported by the fact

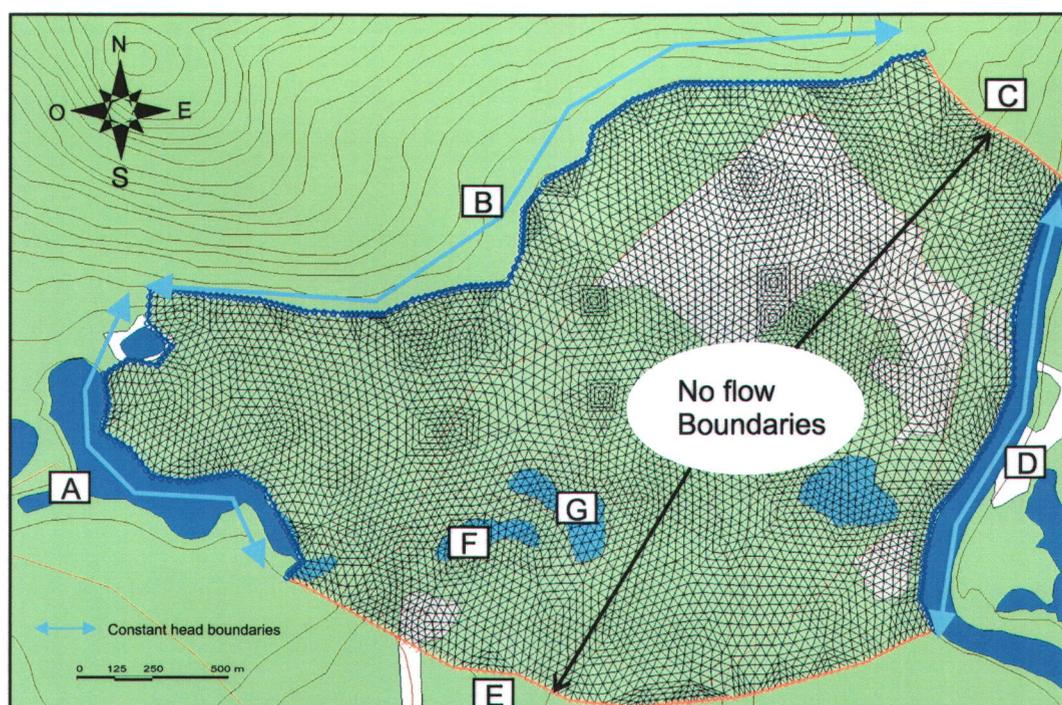


Figure 4.7 – Boundary conditions of the groundwater flow model

that it reproduces model boundaries geometry as well as hydrostratigraphic units (Bordeleau et al., 2007). Moreover, the software enables batch simulations i.e the sequential production of results without user intervention between the runs. It makes the process of multiple realizations less time consuming. The groundwater flow model calibration was simulated assuming a fully saturated domain and steady state.

Groundwater flow model calibration is conducted using only one hydraulic conductivity scenario and following known hydrogeological site boundaries. The scenario used for calibration of the boundaries was chosen after submitting all available scenarios to groundwater flow simulations. The one which minimizes the error with observed hydraulic heads was picked. Figure 4.7 shows boundary conditions while table 4.2 details them. Natural boundaries are the Jacques-Cartier river to the south-east, Perceval Lake to the west and no flow boundaries south-west and north east. The limit B (north-west) is established according to a topographic isoline and can be explained by sedimentary matters being too thin for proper modelling over this limit. The calibrated recharge value is 250 mm/year and is consistent with values obtained in previous works on the studied site (Martel et al., 2009; Ouellon et al., 2008).

This calibration is validated by comparing simulated heads to observed hydraulic heads of Autumn 2005. In order to quantify the agreement between the simulated and observed values, root mean square (RMS) and absolute error were calculated. Figure

Table 4.2 – *Boundary conditions of the groundwater flow model*

Boundary Conditions	Condition Type	Calibrated Parameters
A	1 st Dirichlet	188.0 m
B	1 st Dirichlet	195.0 m
C	2 nd Neuman	Flux = 0
D	1 st Dirichlet	160.0 m
E	2 nd Neuman	Flux = 0
F	1 st Dirichlet	172.0 m
G	1 st Dirichlet	168.0 m

4.8 shows the calibration curve. Simulated hydraulic heads from a "typical" hydraulic conductivity scenario agree fairly well with observed heads. The absolute error is of less than 2 meters, representing less than 5% of measured head variation from lowest to highest value. The circled dots showing the worst fit on the calibration graph can be explained by perched water table sampling. An overhead view of the simulated water table according to this calibrated model is shown on figure 4.9.

4.4.2 K scenarios discrimination

The geostatistical simulations used to define large scale heterogeneities (HF distribution) and small (hydraulic conductivity) heterogeneities are used to build numerous groundwater flow models. 3D heterogeneous hydraulic conductivity grids obtained with geostatistical simulations are then all integrated into groundwater flow models. The Gocad® K grid values are directly assigned to the spatially closest Feflow® prismatic elements. The geometry of the grids being different, an effort had to be made at this point not to make a significant change in scale.

All other simulation parameters were kept constant for the different K scenarios. In order to judge of the integrity and the realism of K distribution scenarios and pick the most adequate ones for transport simulations, every HF distribution scenario has been tested through steady state groundwater flow simulations. As large scale heterogeneities (HF) control mainly groundwater flow, only one distribution of K per HF is assigned at this step. Out of the hundred possible scenarios tested, 10 HF distribution 3D models were retained for transport modelling as they fairly honour observed hydraulic heads. Again, RMS and absolute error were used as decision criteria. The table presenting the discrimination process is shown in appendix A.

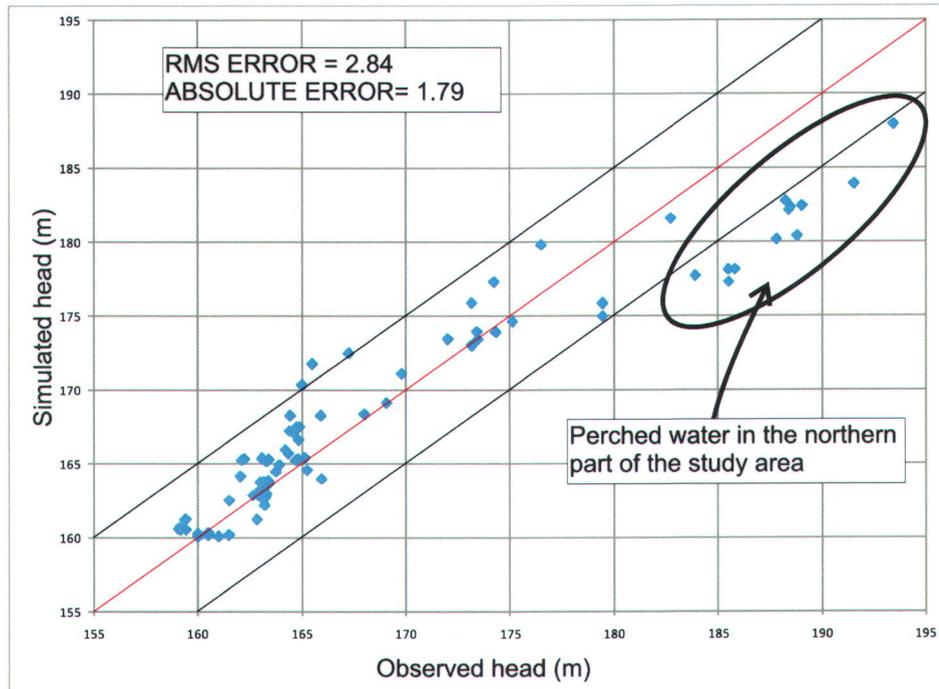


Figure 4.8 – Simulated vs observed hydraulic heads for the calibrated groundwater flow model

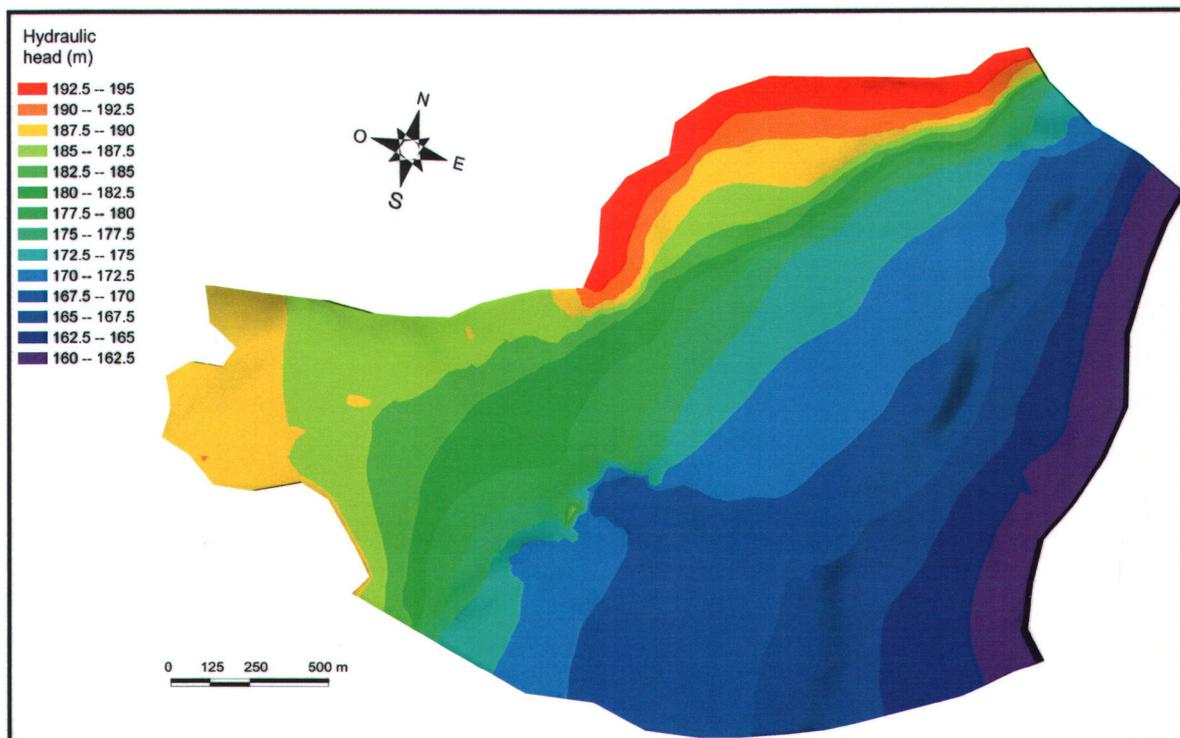


Figure 4.9 – Map of the Simulated hydraulic heads for the calibrated groundwater flow model

4.4.3 Sensitivity analysis

The groundwater flow models of the test area presented in this study have two major sources of uncertainty. Recharge parameters have been evaluated in previous studies in the region (Martel et al., 2009; Ouellon, 2006). Hence, the range of possible applicable values is narrow. Thus, only the hydraulic conductivity, largely sampled but highly heterogeneous and the northern constant head boundary (boundary B, figure 4.7) are high uncertainty sources. As uncertainty on K has been assessed through variability analysis in the study, a sensitivity analysis is not adequate for K. However, this analysis has to be conducted on the constant head limit in the north/north-west section of the test area, because this boundary regulates water entering the model. To make sure that within a range approaching observed data in the area, the model is not that much sensitive to the variations of the constant head limit. Hence, a sensitivity analysis has been ran for head values ranging from 190 to 205 m. Results are shown on figure 4.10.

The RMS error lowers significantly with hydraulic head boundary values going from 190 to 195m at boundary B. This phenomenon can be explained by the definition of

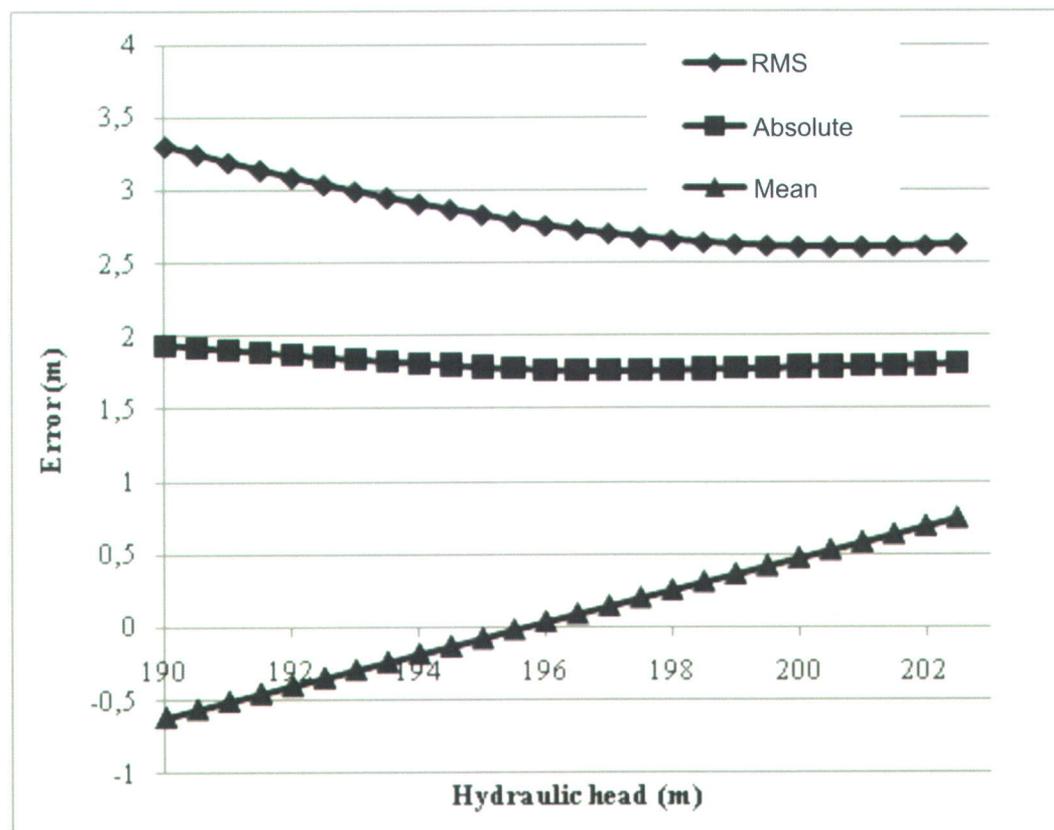


Figure 4.10 – Sensitivity analysis on constant head boundary B

the RMS error tending to be controlled by large marginal error values. Thus, when the imposed boundary condition is not high enough, the hydraulic head in the northern most part of the site is well underestimated and RMS error goes up wildly. The low absolute error variations for the same range reinforce this assumption. In addition, the mean error exposes a linear variation from both sides of the 195m value.

4.4.4 Limitations of the groundwater flow model

The limitations of the calibrated numerical groundwater flow model come mainly from simplification required for modelling and from uncertainties on used observed data. Within the approach used in this study, hydraulic conductivity variability is quantified. However, the spatial and numerical variability of the boundaries cannot be assessed. Moreover, groundwater exchanges between fractured rock and the sediments due to the possible discontinuities of the till aquitard is not covered in this study. Furthermore, the calibration on simulated hydraulic heads in the perched water table in the north-west part of the site probably leads to vertical and horizontal hydraulic gradients not considered in the model. Finally, the study does not evaluate the possible effects of the scale and geometry differences between the Gocad® and Feflow® grids.

4.5 Transport modelling

FEFLOW® software has also been chosen for mass transport modelling through groundwater. For this part of the study, the K models that were retained after the discrimination process in the previous section are used to simulate 50 transport scenarios, from a selected source zone to the main receptor (Jacques-Cartier river). This number of scenarios is represented by ten different HF distributions in which we assign five equiprobable K simulated distributions. Simulated concentrations are expressed as C/C_0 , C_0 being an initial dissolved concentration and C the transported concentrations.

4.5.1 Calibration and transport parameters

The main objective behind modelling with relative simulated concentrations is to represent the effects of a continuous contaminating source zone on a plume development in groundwater. The lateral extent of the source zone was defined considering actual

site activities and the highest concentration measured (see appendix A and B for a summary of the field measurements related to contamination in groundwater). Due to many undocumented activities over the studied site occasioning great variations in locations and time of dissolved mass production, an actual calibration of the transport process through the representation of groundwater samples along the simulated plume was not possible.

For all the layers of the model, an effective porosity of 0.3 has been considered following the work on a similar environment (Ouellon, 2006). Longitudinal and transverse dispersion coefficients had to be estimated empirically as imperative inputs prior to mass transport simulations. Accounting for the scale of the study, longitudinal dispersivity of 10m and a transverse dispersivity of 1m were assigned in relation with the work of Gelhar (1986).

4.5.2 Transport simulated scenarios

The 50 selected transport scenarios were evaluated as relative concentrations varying in space for a period of 20 years. As expected, for all the scenarios, the main thread of the plume follows the downhill gradient like the flow field and exits progressively at the river. However, local variations of the plume progress were observed for the different simulated K models. Indeed, the simulated plume follows different paths depending on the initial HF distribution imposed. Figure 4.11 presents four transport simulated models resulting from different HF distribution. The comparison between these concentration maps exposes the effect of heterogeneities at the HF scale on the simulated plume path. The same way, the effect of heterogeneities at the sub-facies scale can be evaluated. In figure 4.12 post-simulation concentration maps are compared for K models with identical HF distribution but with different K distribution. Once again, there is a considerable impact on the simulated plume shape for different K distribution. In this case although, the effect on the path of the contaminant is less noticeable. As expected, the influence of heterogeneities at this smaller scale yields to variations in the simulated plume width. The effect is almost solely on lateral and transverse dispersion. However, the outcome of such variations directly relates to concentration amplitude at the receptor (river) and must be considered.

The clear advantage of generating multiple realizations of contaminant transport is the production of decision making tools to better manage the groundwater and the actions to preserve it in a sustainable manner. With basic statistical operations on raw data from the mass transport simulations, different maps can be obtained at each time steps. This way snapshots of the mean concentration and standard deviation are

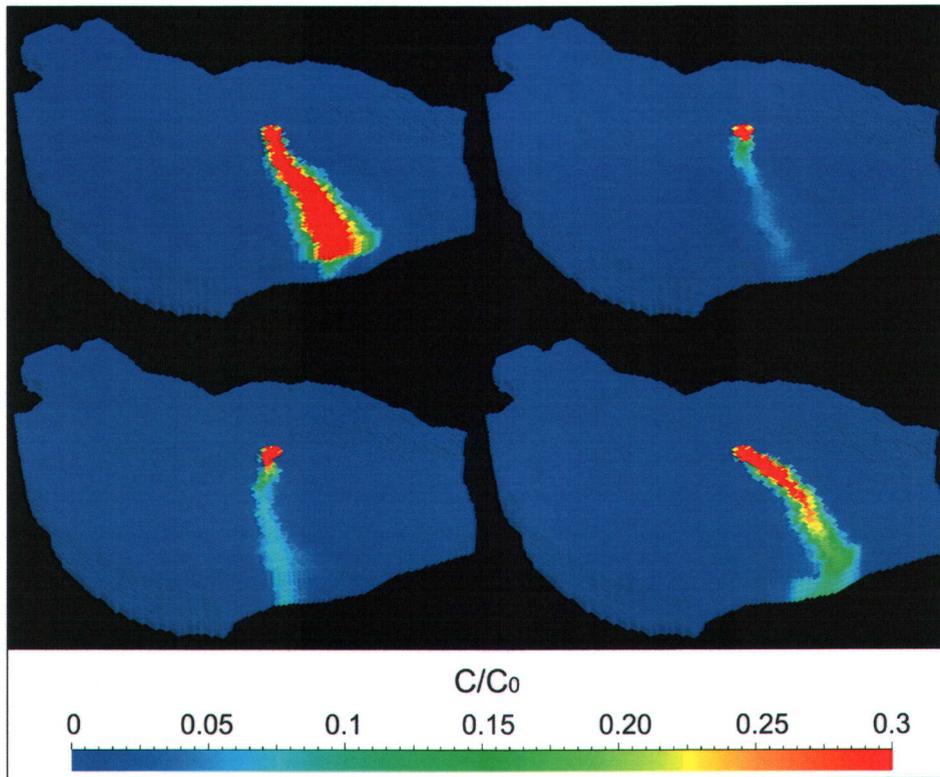


Figure 4.11 – Effect of HF distribution on mass transport

easily available. This methodology also enables the production of probability maps. An example of this decision making tool is illustrated on figure 4.13 for the final time step (20 years). With such a map, authority responsible of site management can orientate their rehabilitation decisions on probabilities considering a predetermined threshold.

4.5.3 Comparison to mean K model

For the total simulation time length (20 years), observation points recorded the contaminant concentration variations on the entire interface between the river and the site. A model of K, representing the average of all the simulated K models (4.14) was used as an input in a mass transport model to compare the arrival time of the simulated plume and the concentration amplitude difference between a smooth deterministic K model and 50 simulated K model representing heterogeneity. The breakthrough curves associated with the 50 simulated K models and their comparison with the associated mean K model are shown on figure 4.15

As shown on the breakthrough curves comparison graph, the time of arrival of the simulated plume seems overestimated while the relative concentration is apparently

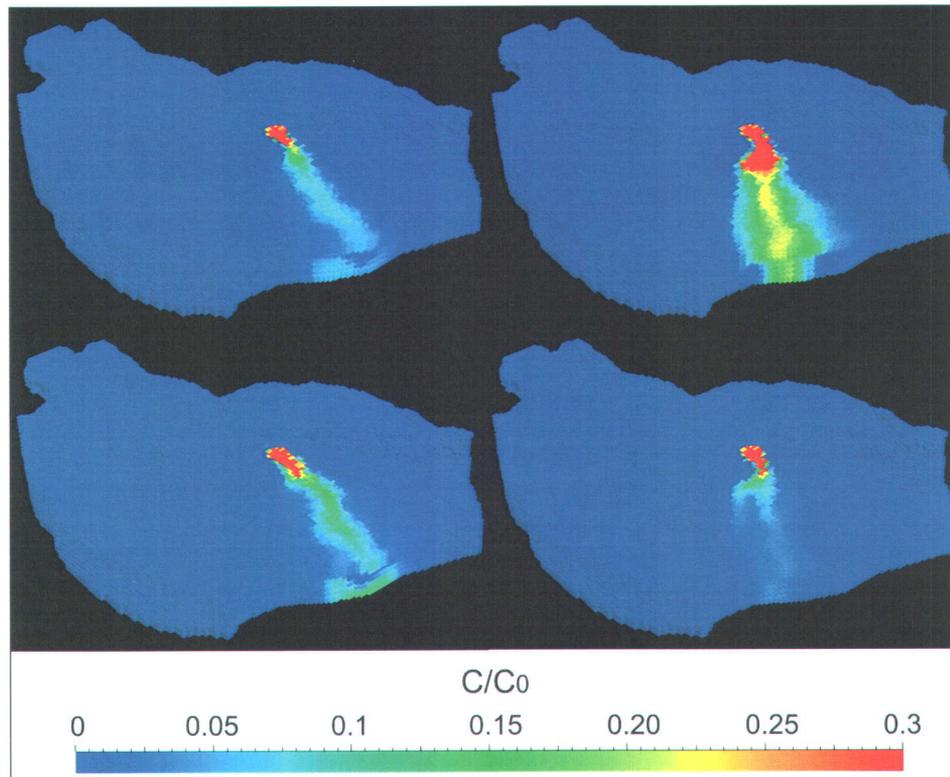


Figure 4.12 – Effect of K distribution within one HF on mass transport

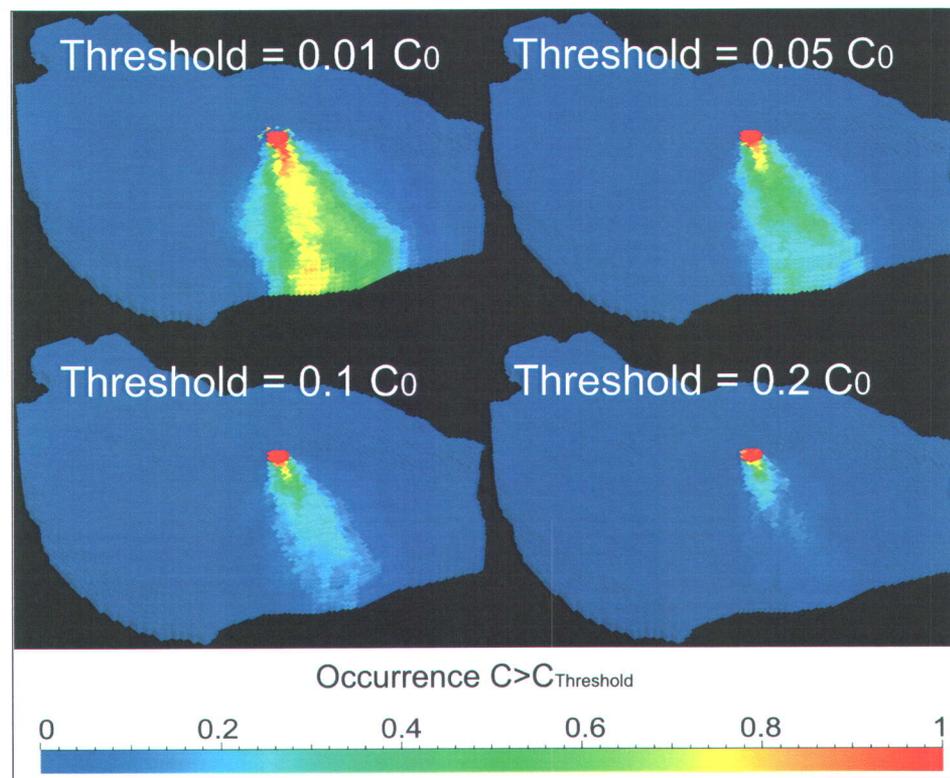


Figure 4.13 – Exemple of decision-making tools : Probability map of overpassing a treshold

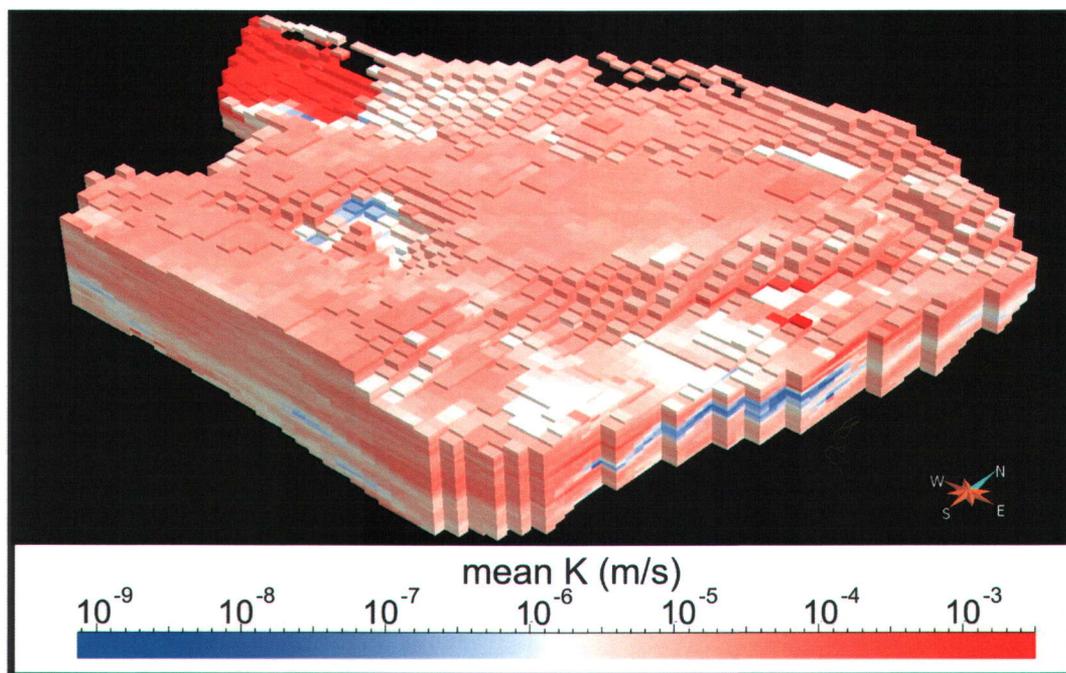


Figure 4.14 – Mean model of the simulated K scenarios

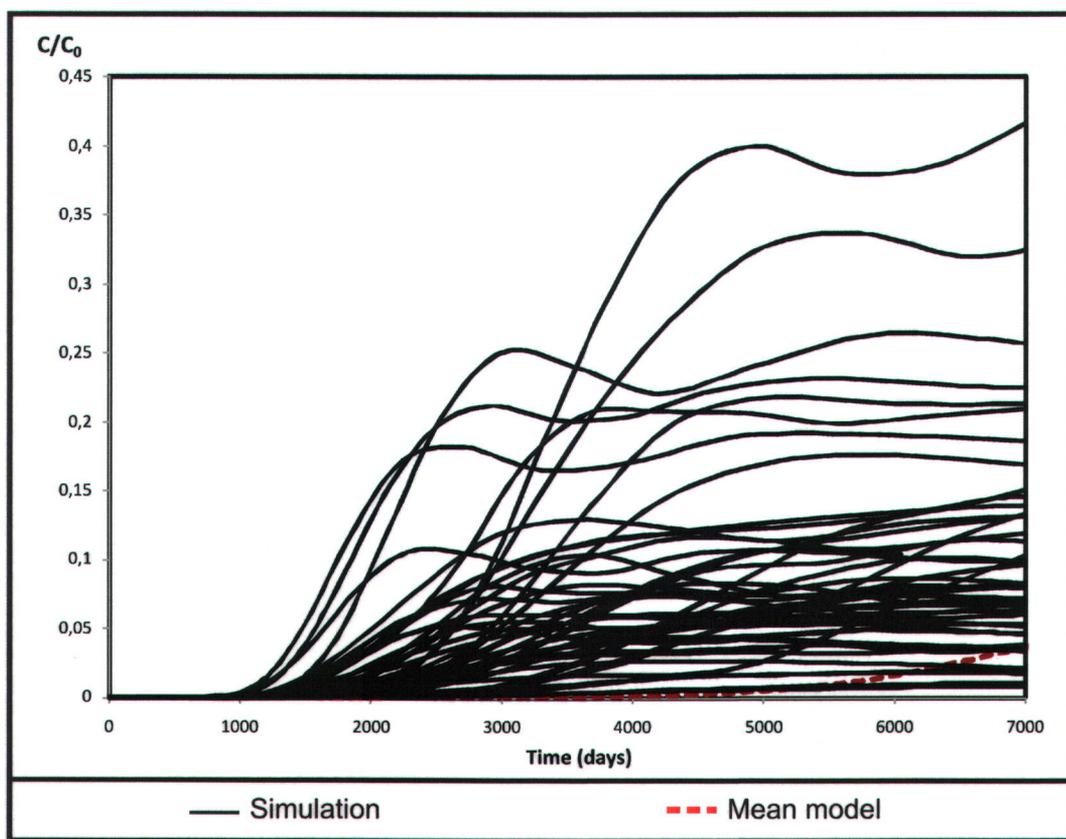


Figure 4.15 – Breakthrough curves comparison between simulated K models and the average K model

underestimated on the smooth deterministic model. This has a huge impact on the way remediation and management of the groundwater should be investigated.

4.6 Conclusion

Multiple-point geostatistics were used to define HF heterogeneity and represent different pattern of preferential flow paths. The use of this method was time efficient, represented well the geological heterogeneity and promoted collaboration with geologists. Sequential Gaussian simulations were used to assign heterogeneous hydraulic conductivity distribution within each HF. It uses a straight-forward approach and it is also time efficient. However, the 3D variogram production for K hard-data was very challenging.

The need to define heterogeneities at different structure levels was exposed. Indeed, heterogeneities at the HF scale seemed to influence the path of the simulated plume, resulting in different concentration amplitudes at the receptor (river) and significant projected contamination impact zone displacement. The heterogeneity at the sub-facies scale influenced on both lateral and transverse dispersion having for consequence changes in simulated plume spread. Hence, the amplitude of the concentrations at the receptor is also variable and the extent of the potentially contaminated zone as well.

Initially 500 K scenarios were built and 50 were kept for mass transport modelling after being discriminated through the comparison with groundwater flow simulations. Building multiple statistically equivalent models enabled the production of efficient decision making tools such as probability maps. It also allowed defining the uncertainty on modelling at every step (from HF heterogeneity definition to mass transport simulations).

A kriged-like model of hydraulic conductivity was used to compare a deterministic approach to the use of multiple geostatistical simulations. The breakthrough curves revealed the weaknesses of the smooth K model. The extreme values not being reproduced by such a model, it tends to underestimate the simulated contamination progress in space and time. It is to be noted that the dispersion coefficient used as an input for the mass transport simulations was the same for the mean K model and the geostatistically simulated K models. This coefficient could have been adjusted for the mean K model and the resulting break through curve would have probably been more in agreement with the shape of the other curves. However, this adjustment would be totally arbitrary aiming only the reproduction of either limited data sets or expected values.

The methodology developed in this paper yields to rapid production of multiple mass transport simulations. The approach considers 2 types of heterogeneity to assess for uncertainty of the modelling process. The use of more indirect data such as geophysical profiles to constrain HF model generation would improve the workflow and help lowering variability. Moreover, the discrimination of K scenarios would be more accurate if they were constrained using dynamic data such as tracer tests.

Conclusion

L'objectif principal de ce projet de maîtrise était de développer des outils décisionnels dans le but de soutenir la gestion durable de la ressource en eau souterraine. Le secteur d'essais de RDDC-Valcartier a permis d'appliquer la méthodologie développée à une échelle locale et d'atteindre les buts fixés. La grande disponibilité de données sur le site à l'étude a facilité la réalisation du projet et la réalisation de deux objectifs plus spécifiques. Afin de parvenir à l'objectif principal, l'hétérogénéité du site devait être défini et l'écoulement souterrain et le transport de masse devaient être modélisés.

Définition de l'hétérogénéité

Le système sédimentaire en place sur le site à l'étude présentait beaucoup de variabilité en termes d'arrangement et de taille des faciès géologiques. Il a alors été jugé important de caractériser et quantifier cette hétérogénéité. Après la construction d'un modèle géologique initial considérant l'origine des sédiments et regroupant six unités stratigraphiques principales, la construction de modèles avec des simulations géostatistiques visant l'imitation de structure a été entrepris. Les unités géologiques et les interprétations de forages ont alors été classées en faciès hydrauliques appelés hydrofaciès (HF). L'approche utilisée visait la caractérisation de l'hétérogénéité des HF et celle sub-HF (hétérogénéité de la conductivité hydraulique (K)).

Hétérogénéité des HF

Quatre catégories de HF ont été utilisées pour la modélisation géostatistique 3D des HF. Pour un temps de calcul ordinateur approximatif de 24h, 100 modèles équiprobables de distribution des HF ont été générés à l'aide de simulations géostatistiques multi-points (MPG). Les modèles construits sont hautement hétérogènes tel que décrit par

les géologues. De plus, les différents scénarios de distribution de l'unité silteuse fine sont vraiment plus réalistes que celui du modèle géologique initial. Comme il existe une grande incertitude sur la continuité (ou discontinuité) spatiale de cet HF, la production de plusieurs scénarios permet d'en tenir compte. Ainsi, les simulations MPG ce sont avérées être un outil «basé-pixel» efficace pour la caractérisation de l'hétérogénéité des HF dans un système sédimentaire hautement variable. Cette méthode est efficace en termes de temps de simulation et ne requiert pas la production d'un variogramme d'indicatrice. Par contre, il est nécessaire d'avoir une «image d'entraînement» représentative de l'image à produire et/ou de la séquence stratigraphique. Les données dures utilisées pour le conditionnement telles que la carte de la géologie de surface et les interprétations de forage sont respectées dans les modèles simulés. Enfin, l'intégrité hydrogéologique des différents scénarios a été vérifiée après l'assignation de propriétés hydrauliques. Déjà, à ce moment-ci du processus de modélisation, une analyse statistique sur la probabilité d'occurrence de chacun des HF renseigne sur l'incertitude. En effet, certaines zones montrent une variation importante de l'HF assigné d'un scénario à l'autre. Cette information peut s'avérer utile pour l'échantillonnage futur sur le site.

Hétérogénéité de K

Cette étape du projet a permis de générer un total de 500 scénarios équiprobables de la distribution 3D de la conductivité hydraulique. Ce nombre de réalisations s'explique par la production de 5 différents modèles de K par modèle de HF. Les simulations séquentielles gaussiennes (SGS) ont été l'outil géostatistique pour y parvenir. Un variogramme et une distribution propre à chacun des HF ont été utilisés pour simuler des valeurs de K. Les SGS se sont avérés être un outil fiable, facile d'utilisation et efficace en terme de temps de calcul ordinateur. Elles ont permis de reproduire les valeurs extrêmes de K et de générer des distributions spatiales hétérogènes de K à l'intérieur des HF. D'un autre côté, la modélisation de variogramme 3D des valeurs mesurées de K ont présenté un défi. En effet, la distribution spatiale inégale des échantillons à l'intérieur de chacun des HF a résulté en des variogrammes expérimentaux chaotiques sur lesquels il était difficile d'ajuster des variogrammes théoriques. Il existe également d'importantes incertitudes en ce qui a trait à la résolution et à l'intégrité des mesures de K. Toutefois, l'approche utilisée dans ce projet permet de quantifier cette incertitude et permet de cibler les zones sur le site à l'étude où celle-ci est la plus importante. À nouveau, une telle information permet une prise de décision éclairée pour les travaux de terrain subséquents.

Modélisation hydrogéologique

L'hétérogénéité de tout le système représentant l'aquifère sédimentaire a été caractérisé. Les modèles de conductivité hydraulique résultant ont par la suite été validés en les intégrant dans un modèle d'écoulement. Les scénarios les plus réalistes ont pu ainsi être utilisés pour générer différents scénarios de transport de contaminants sur le site. Ces dernières étapes ont permis d'atteindre l'objectif principal du projet et de proposer des exemples d'outils décisionnels pertinents pour les gestionnaires du site à l'étude.

Écoulement souterrain

La modélisation de l'écoulement souterrain a été effectuée à l'aide du logiciel FE-FLOW[®] assumant un milieu entièrement saturé en régime permanent. Un premier modèle de K a initialement été utilisé pour caler le modèle sur les données mesurées et définir les conditions frontières. Cette démarche a permis d'obtenir une concordance acceptable entre les valeurs de charges hydrauliques simulées et celles observées. L'écart entre les mesures correspond à 5% de l'étendue totale des données. Toutefois, les données piézométriques mesurées pour la nappe perchée ont été difficile à reproduire. Une modélisation séparée des milieux aurait pu être plus adéquate. Une fois l'environnement de simulation définie, les différents scénarios de K ont été intégrés tour à tour et les charges hydrauliques simulées résultantes ont été comparées aux données observées. Considérant l'influence de la distribution des HF comme prédominante dans le processus d'écoulement et soucieux d'alléger le processus de sélection, un seul modèle de K par scénario de distribution d'HF a été testé à cette étape-ci. Le processus de discrimination selon l'erreur par rapport aux valeurs mesurées a été mené sur 100 modèles de K (voir Annexe A). Les 10 scénarios jugés les plus réalistes correspondant à 10 différentes distributions de HF et K ont été sélectionnés pour la modélisation en transport. Finalement, 50 modèles de K différents ont été utilisés pour le calcul du transport de masse (10 modèles HF X 5 modèles de K).

Transport de masse

Les scénarios de transport de masse ont été évalués en termes de concentrations relatives variant dans l'espace sur une période de 20 ans. Tel qu'attendu, la tendance principale du panache de contaminants suit la dépression piézométrique partant de la

zone source au nord du site et sortant à la rivière Jacques-Cartier. Cependant, pour les différents modèles de K, des variations locales du parcours du panache et de l'amplitude de la concentration ont été observées. En effet, la distribution variable des HF semble mener à la création de chemins préférentiels différents et exerce une influence sur le parcours et la localisation de l'arrivée du panache à la rivière. D'un autre côté, les variations au niveau de la distribution de K à l'intérieur d'un même modèle d'HF entraînent des changements du patron de dispersion du contaminant. Ainsi, l'amplitude et l'aire de contamination sont modifiées d'un scénario à l'autre. Ce comportement du panache selon le modèle de K vient justifier la définition dans la méthode de l'hétérogénéité à 2 échelles différentes.

Un exercice visant la comparaison de l'utilisation de méthodes déterministes (production d'un modèle lisse de K) et la génération de multiples modèles a été effectué. Un modèle de K correspondant à la moyenne des résultats de simulations SGS a été intégré au modèle de transport de masse. Ainsi, la courbe d'amplitude de la contamination à la rivière en fonction du temps de ce modèle a pu être comparée à celles des 50 autres modèles. Les valeurs extrêmes de K n'étant pas reproduites dans un modèle lisse, le temps d'arrivée du panache à la rivière semble être surestimé et l'amplitude de la contamination sous-estimée. Le modèle lisse néglige les chemins préférentiels et simule moins de dispersion. Il est certain que l'ajustement à la hausse des coefficients de dispersion latéral et transversal aurait permis une meilleure parité entre les résultats. Cependant, l'ajustement d'un tel coefficient aurait été arbitraire.

Enfin, un exemple d'outil décisionnel a été produit à l'aide de statistiques de base sur les 50 modèles de concentration de contaminants après 20 ans. Des cartes de probabilités de dépassement d'un critère ont été présentées. Ces cartes peuvent permettre aux gestionnaires du site à l'étude d'orienter leurs interventions (réhabilitation, mesures d'atténuation...) sur des critères tenant compte de l'incertitude et peuvent quantifier les risques de non-intervention. Il est à noter que les résultats de la modélisation du transport de contaminants ont été jugés acceptables d'après une analyse approximative des concentrations mesurées sur le site au cours des dernières années (voir tableaux en annexe A et cartes en annexe B).

Perspectives

L'approche utilisée pour la caractérisation du transport de contaminants en eau souterraine pour le secteur d'essais de RDDC-Valcartier a fourni des résultats intéressants et des outils pratiques pour les gestionnaires. Certaines démarches pourraient cepen-

dant améliorer la connaissance du site et/ou bonifier le processus scientifique du projet. Par exemple, l'intégration supplémentaire de mesures indirectes (e.g. méthodes géophysiques) permettrait de contraindre davantage les modèles d'HF et d'assurer un meilleur contrôle sur la continuité latérale des couches. De plus, certaines techniques géophysiques permettent la construction d'un modèle hydrogéophysique pouvant être corrélé à la distribution de la conductivité hydraulique. Au niveau du calage du modèle d'écoulement et de la sélection des scénarios les plus réalistes de K, la modélisation en régime transitoire et la comparaison avec des données dynamiques de type traceurs géochimiques serait plus adéquate. L'effet de changement d'échelle dans la grille de modélisation de K, de l'écoulement souterrain et du transport de masse pourrait également être développé. Enfin, pour améliorer la connaissance du site à l'étude et pour fournir une information plus complète au gestionnaire de ce site, l'étude de la migration des contaminants depuis la source jusqu'au milieu saturé permettrait une modélisation complète de la source au récepteur.

Bibliographie

- Anderson, M., Aiken, J., Webb, E., et Mickelson, D. (1999). Sedimentology and hydrogeology of two braided stream deposits. *Sedimentary Geology*, 129(3-4) :187–199.
- Bordeleau, G., Martel, R., Schäfer, D., Ampleman, G., et Thiboutot, S. (2007). Groundwater flow and contaminant transport modelling at an air weapons range. *Environmental Geology*, 55(2) :385–396.
- Boucher, A. (2008). *Super Resolution Mapping with Multiple Point Geostatistics*, pages 297–305. Springer Berlin / Heidelberg, geoenv vi edition.
- Bouwer, H. et Rice, R. (1976). A slug test for determining hydraulic conductivity of unconfined aquifers. *Water Resources Research*.
- Bridge, J. S. (1975). Computer simulation of sedimentation in meandering streams. *Sedimentology*, 22(1) :3–43.
- Cabello, J. L., Cuevas, P., et Ramos, E. (2007). 3D modelling of grain size distribution in Quaternary deltaic deposits (Llobregat Delta , NE Spain). *Geologica Acta*, 5(3) :231–244.
- Caers, J. (2002). Multiple-point geostatistics : a quantitative vehicle for integrating geologic analogs into multiple reservoir models.
- Chilès, J. et Delfiner, P. (1999). *Geostatistics : Modeling Spatial Uncertainty*. Wiley, New York.
- Dagan, G. (1985). Stochastic Modeling of Groundwater Flow by Unconditional and Conditional Probabilities : The Inverse Problem. *Water Resources Research*, 21(1) :65–72.
- De Marsily, G., Delay, F., Gonçalves, J., Renard, P., Teles, V., et Violette, S. (2005). Dealing with spatial heterogeneity. *Hydrogeology Journal*, 13(1) :161–183.
- Deutsch, C. et Journel, A. (1992). GSLIB : Geostatistical software library and user's guide. *New York*.

- Diersch, H. (2002). FEFLOW reference manual. *WASY Ltd.*
- Domenico, P. et Schwartz, F. (1998). *Physical and chemical hydrogeology*. Wiley New York.
- Falivene, O., Cabrera, L., Muñoz, J. A., Arbués, P., Fernández, O., et Sáez, A. (2007). Statistical grid-based facies reconstruction and modelling of sedimentary bodies. Alluvial-palustrine and turbiditic selected examples. *Geologica Acta*, 5(3) :199–230.
- Fauveau, E. (2006). Caractérisation hydrogéologique des sédiments meubles avec les sondages par enfoncement et rotoperçusion. *Mémoire de maîtrise*, INRS-ETE.
- Feyen, L. et Caers, J. (2004). *Multiple-point geostatistics : a powerful tool to improve groundwater flow and transport predictions in multi-modal formations*, pages 197–207. Springer Berlin / Heidelberg.
- Fleckenstein, J. H. et Fogg, G. E. (2008). Efficient upscaling of hydraulic conductivity in heterogeneous alluvial aquifers. *Hydrogeology Journal*, 16(7) :1239–1250.
- Fogg, G. (1986). Groundwater flow and sand body interconnectedness in a thick, multiple-aquifer system. *Water Resources Research*, 22(5) :679–694.
- Freeze, R. et Cherry, J. (1979). *Groundwater*. Number 39942. London, prentice-h edition.
- Frei, S., Fleckenstein, J., Kollet, S., et Maxwell, R. (2009). Patterns and dynamics of river–aquifer exchange with variably-saturated flow using a fully-coupled model. *Journal of Hydrology*, 375(3-4) :383–393.
- Gelhar, L. (1986). Stochastic subsurface hydrology from theory to applications. *Water Resour. Res*, 22(6) :135–145.
- Goovaerts, P. (1997). *Geostatistics for natural resources evaluation*. Oxford University Press, USA, New York.
- Guardiano, F. et Srivastava, R. (1993). Multivariate geostatistics : beyond bivariate moments. *Geostatistics-Troia*, pages 133–144.
- Hu, L. Y. et Chugunova, T. (2008). Multiple-point geostatistics for modeling subsurface heterogeneity : A comprehensive review. *Water Resources Research*, 44 :1–14.
- Hubbard, S. et Rubin, Y. (2005). *Introduction to hydrogeophysics*, pages 3–21.
- Journel, A. (1983). Nonparametric estimation of spatial distributions. *Mathematical Geology*, 15(3) :445–468.

- Journal, A. et Alabert, F. (1989). Non-Gaussian data expansion in the Earth Sciences. *Terra Nova*, 1(2) :123–134.
- Journal, A. et Huijbregts, C. (1978). Mining geostatistics. *New York*.
- Koltermann, C. E. et Gorelick, S. M. (1996). Heterogeneity in sedimentary deposits : A review of structure-imitating, process-imitating and descriptive approaches. *Water Resources Research*, 32(9) :2617–2658.
- Mariethoz, G., Renard, P., Cornaton, F., et Jaquet, O. (2009). Truncated Plurigaussian Simulations to Characterize Aquifer Heterogeneity. *Ground Water*, 47(1) :13–24.
- Martel, R., Poulin-Talbot, M.-C., Agassounon, C., Gabriel, U., Dionne, N., et Ross, M. (2009). Étude hydrogéologique du secteur d'essais RDDC Valcartier. *Rapport de recherche R-955*, INRS-ETE :142p.
- Matheron, G. (1963). Principles of geostatistics. *Economic geology*, 58 :1246–1266.
- Matheron, G. (1967). Éléments pour une Theorie des Milieux poreux.
- Matheron, G. (1973). The Intrinsic Random Functions and Their Applications. *Advances in Applied Probability*, 5(3) :439.
- Michaud, Y., Parent, M., Mailloux, M., Boisvert, E., Lefebvre, R., Martel, R., Boivin, R., Roy, N., et Hains, S. (1999). Cartographie des formations superficielles et cartographie hydrogéologique de la base des Forces canadiennes Valcartier. *Rapport interne CGQ soumis à l'unité de soutien du Secteur Valcartier*.
- Ouellon, T. (2006). Distribution spatiale de la conductivité hydraulique dans le système aquifère de Valcartier et influence de l'hétérogénéité sur la modélisation de l'écoulement. *Mémoire de maîtrise*, INRS-ETE :121p.
- Ouellon, T., Lefebvre, R., Marcotte, D., Boutin, A., Blais, V., et Parent, M. (2008). Hydraulic conductivity heterogeneity of a local deltaic aquifer system from the kriged 3D distribution of hydrofacies from borehole logs , Valcartier , Canada. *Journal of Hydrology*, 351 :71– 86.
- Parent, M., Girard, F., Fagnan, N., Michaud, Y., Boisvert, E., et Fortier, R. (2003). Caractérisation géologique des formations superficielles enfouies. *In : Michaud, Y., Lefebvre, R., McCormack, R, Guide méthodologique pour la caractérisation régionale des aquifères granulaires*, page 140pp.
- Poulin-Talbot, M.-C., Martel, R., Ross, M., et Agassounon, C. (2007). Étude géologique et hydrogéologique des données existantes du secteur d'essais de RDDC-Valcartier de 1990 à 2005. *Rapport de recherche R-941*, INRS-ETE :34p.

- Ravalec, M., Noetinger, B., et Hu, L. (2000). The FFT moving average (FFT-MA) generator : An efficient numerical method for generating and conditioning Gaussian simulations. *Mathematical Geology*, 32(6).
- Ritzi, R., Dominic, D., Brown, N., Kausch, K., McAlenney, P., et Basial, M. (1995). Hydrofacies distribution and correlation in the Miami Valley aquifer system. *Water Resources Research*, 31(12) :3271–3281.
- Robertson, P., Campanella, R., Gillespie, D., et Greig, J. (1986). Use of piezometer cone data. *Proceedings of the ASCE speciality conference In Situ '86 : Use of in situ test in geotechnical engineering*, Blacksburg.
- Sensors & softwares (2001). *EKKO-for-DVL User's Guide*. Number 905. Toronto, Canada.
- Shinn, J. D., Timian, D. A., Morey, R. M., Mitchell, G., Antle, C. L., et Hull, R. (1998). Development of a CPT deployed probe for in situ measurement of volumetric soil moisture content and electrical resistivity. *Field Analytical Chemistry & Technology*, 2(2) :103–109.
- Strebelle, S. (2002). *Conditional Simulation of Complex Geological Structures Using Multiple-point statistics*, pages 1–21. Springer Netherland.
- Strebelle, S. et Journel, A. (2000). Sequential simulation drawing structures from training images. *Stanford Center for Reservoir Forecasting Annual Report*, 13 :1–12.
- Sudicky, E., Cherry, J., et Frind, E. (1983). Migration of contaminants in groundwater at a landfill : A case study : : 4. A natural-gradient dispersion test. *Journal of Hydrology*.
- Webb, E. K. (1994). Simulating the three-dimensional distribution of sediment units in braided-stream deposits. *Journal of Sedimentary Research*, 64(2b) :219–231.

Annexe A : Tableaux et figures complémentaires (Disponible sur DVD)

Tableau A1 : Mesure du couvert nival de l'automne 2009.

Tableau A2 : Résumé des résultats obtenus pour l'eau souterraine 2004-2007 utilisés pour produire les cartes.

Tableau A3 : Résumé des résultats obtenus dans l'eau de résurgence 2006 utilisés pour produire les cartes.

Tableau A4 : Discrimination des scénarios hydrostratigraphiques.

Figure A1 : Sondage CPT ESS1.

Figure A2 : Sondage CPT ESS2.

Figure A3 : Sondage CPT ESS4.

Annexe B : Cartes des concentrations mesurées au secteur d'essais (Disponible sur DVD)

Carte B1 : Concentrations en perchlorate dans l'eau souterraine et l'eau de résurgence de l'été 2004 à l'automne 2007 au secteur d'essais Valcartier.

Carte B2 : Concentrations en RDX dans l'eau souterraine et l'eau de résurgence de l'été 2003 à l'automne 2007 au secteur d'essais Valcartier.

Carte B3 : Concentrations en cuivre dans l'eau souterraine et l'eau de résurgence de l'été 2003 à l'automne 2007 au secteur d'essais Valcartier.

Carte B4 : Concentrations en plomb dans l'eau souterraine et l'eau de résurgence de l'été 2003 à l'automne 2007 au secteur d'essais Valcartier.

Carte B5 : Concentrations en chrome dans l'eau souterraine et l'eau de résurgence de l'été 2003 à l'automne 2007 au secteur d'essais Valcartier.

Carte B6 : Concentrations en zinc dans l'eau souterraine et l'eau de résurgence de l'été 2003 à l'automne 2007 au secteur d'essais Valcartier.

Annexe C : Résultats d'interprétation complémentaires et fichiers de modélisation (Disponible sur DVD)

Archive C1 : Fichiers FEFLOW[©] utilisés pour la modélisation en transport de masse.

Archive C2 : Fichiers textes comprenant une liste de commande afin de d'automatiser certaines opérations dans le logiciel Gocad.

Archive C3 : Données brutes et interprétations des mesures de conductivité hydraulique.

Archive C4 : Résultats et fichiers sources issus de la production de coupes avec le logiciel Traverse[©].

Archive C5 : Fichiers Gocad de modélisation 3D : modèle géologique initial, modèles d'hydrofaciès, modèles de K et images des concentrations simulées.

Archive C6 : Résultats des concentrations simulées aux points d'observation pour les simulations en transport de masse.

Archive C7 : Résultats des charges hydrauliques simulées lors des simulations en écoulement et résultats du calage sur les charges hydrauliques observées.

Archive C8 : Données provenant de la campagne de levés de radar géologique de Valcartier à l'automne 2008.

Archive C9 : Fichiers contenant les descriptions et les interprétations des données de forage existantes au secteur d'essais.

Archive C10 : Présentations données aux différentes conférences relatives au projet de maîtrise.