



Modélisation des Hydrosystèmes Continentaux pour une Gestion Durable de la Ressource en Eau

Nicolas Flipo

► To cite this version:

Nicolas Flipo. Modélisation des Hydrosystèmes Continentaux pour une Gestion Durable de la Ressource en Eau. Interfaces continentales, environnement. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2013. tel-00879449

HAL Id: tel-00879449

<https://theses.hal.science/tel-00879449>

Submitted on 4 Nov 2013

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

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

UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE – PARIS VI
SPÉCIALITÉ SCIENCES DE LA TERRE ET DE L'UNIVERS

HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

Modélisation des Hydrosystèmes Continentaux pour une Gestion Durable de la Ressource en Eau

Nicolas Flipo

Soutenue le 27 juin 2013 devant un jury composé de :

Jean-Marie Mouchel	Pr, Université Pierre et Marie Curie	Président
Frédéric Delay	Pr, Université de Strasbourg	Rapporteur
Philippe Renard	DR, Université de Neuchâtel	Rapporteur
José Miguel Sánchez-Pérez	DR CNRS, Université de Toulouse	Rapporteur
Ghislain de Marsily	Pr, Université Pierre et Marie Curie Académie des Sciences	Examineur
Patrick Goblet	DR, Mines ParisTech	Examineur
Pierre Marmonier	Pr, Université de Lyon	Examineur
Florentina Moatar	Pr, Université de Tours	Examineur

Résumé

L'ensemble des travaux présentés ici est centré sur la modélisation des hydrosystèmes continentaux comme support de la gestion durable de la ressource en eau. Ils portent sur la compréhension du cycle de l'eau, du fonctionnement des interfaces nappe-rivière, et de l'impact de l'anthropisation sur la qualité des eaux (pratiques agricoles, rejets urbains). Une réflexion transverse sur une meilleure imbrication entre stratégies d'échantillonnage et stratégies de modélisation, et un souci permanent de quantifier les incertitudes liées aux modèles déterministes au moyen de diverses techniques, sont aussi au cœur des travaux présentés.

Le premier chapitre s'intéresse aux bases de la modélisation quantitative des hydrosystèmes continentaux. L'utilisation de cartes piézométriques permet de mettre en œuvre des techniques de calibration automatique, via des approches inverses, de modèles simulant les écoulements souterrains. Ce potentiel a été exploité par la conceptualisation d'une méthodologie hybride d'ajustement de MMD (modèle mécaniste distribué) d'hydrosystème. La simulation du bassin de la Loire réalisée avec EauDyssée, couplée à l'utilisation du modèle linéaire de co-régionalisation pour analyser les différentes composantes du cycle de l'eau, mènent à la conclusion que le système aquifère est en légère sur-exploitation.

Un retour sur le concept d'hydrosystème continental permet de le structurer explicitement autour de ses interfaces emboîtées. Ce cadre théorique permet alors d'aborder la problématique des échanges nappe-rivière en fonction des échelles d'étude, et d'identifier l'échelle intermédiaire du corridor fluvial comme étant la clé de voûte des emboîtements d'échelles. De plus, ce découpage affiné de l'hydrosystème facilite la réflexion nécessaire à la mise en place de systèmes d'observation multi-échelle du comportement hydrologique des interfaces nappe-rivière. Si les échelles locales et intermédiaires autorisent le déploiement de tels systèmes, une analyse bibliographique approfondie montre qu'il n'en va pas de même de l'échelle régionale, pour laquelle des méthodologies couplant observations et modélisations doivent être développées. Il est alors montré que l'utilisation du modèle résistif couplé à une simulation dynamique des niveaux d'eau en rivière permet de bien simuler les comportements piézométriques à court et moyen termes.

Le dernier chapitre démarre par la mise en œuvre du modèle hydro-écologique, PROSE, sur le linéaire de la Seine depuis l'amont de Paris jusqu'à l'estuaire. L'étude de l'interaction entre les processus biogéochimiques et les processus hydro-sédimentaires révèle l'importance de ces derniers. L'impact des stocks de vase sur l'oxygénation des eaux de surface est aussi significatif pour les rivières aval. Le rôle joué par les interfaces devient primordial dans les têtes de bassin, où elles contrôlent la qualité de l'eau. Pour le bassin amont du Grand Morin, la modélisation du devenir des nitrates d'origine agricole, a permis de montrer que l'azote était éliminé, dans sa grande majorité, au niveau des interfaces nappe-rivière. Finalement, afin de mieux comprendre le devenir des nitrates dans les grandes rivières, la comparaison de deux cadres cognitifs (interprétation des observations et représentations des processus) a été menée à l'aide du modèle linéaire de co-régionalisation. Appliquée à la Seine, cette approche a permis d'analyser les écarts, entre modèles et mesures, associés soit à des erreurs de forçage du modèle déterministe (conditions aux limites), soit à des erreurs de formalisme des processus physiques ou/et de paramétrisation du modèle.

Mots-clefs : Hydrosystèmes continentaux, Ressource en eau, Modélisation, Hydrologie, Hydrogéologie, Biogéochimie, Hydrogéophysique, Géostatistique

Abstract

The work presented here deals with continental hydrosystem modelling for sustainable management of water resources. It aims at better understanding the hydrological cycle, stream-aquifer interfaces functioning, as well as the anthropogenic impacts on water quality (agricultural practices, urban effluents).

Understanding the temporal and spatial variations of piezometric heads is a prerequisite to achieve a sustainable water management. First piezometric head spatial distribution are estimated using various interpolation techniques. Afterwards they are used to perform an automatic calibration of the diffusivity equation. Based on an extensive literature review on multi-parameter optimization and inverse problem, a pragmatic hybrid fitting method that couples manual and automatic calibration is developed for Distributed Process Based Models (DPBMs) of hydrosystems. Three independent data subsets are used for calibration (10 yr), validation (10 yr) and test (35 yr). The fitted DPBM, coupled with a linear model of co-regionalization, is then used to quantify the hydrosystem water mass balance between 1974 and 2009 on the Loire bassin, indicating that the aquifer system is slightly over-exploited.

Recent developments in hydrological modelling are based on a view of the stream-aquifer interface being a single continuum through which water flows. These coupled hydrological-hydrogeological models, emphasizing the importance of the stream-aquifer interface, are more and more used in hydrological sciences for pluri-disciplinary studies aiming at questioning environmental issues. We first define the concept of nested stream-aquifer interfaces as a key transitional component of continental hydrosystem. Based on a literature review, we then demonstrate the usefulness of the concept for the multi-dimensional study of the stream-aquifer interface, with a special emphasis on the stream network which is identified as the key component for scaling hydrological processes occurring at the interface. Finally we focus on the stream-aquifer interface modelling at different scales, with up-to-date methodologies and give some guidances for interdisciplinary approaches that couple multi-dimensional monitoring and modelling of the interface.

Finally water quality models are investigated based on the river continuum concept that considers community centered models. The PROSE model is used to simulate the Seine river from Paris City to the entrance of the estuary. It appears that hydro-sedimentary processes are of primary importance with regards to the biogeochemical functioning of the river. The influence of stream-aquifer interfaces on biogeochemical fluxes grows even more further upstream. Finally, geostatistics is used to reduce DPBM uncertainties when assessing nitrate concentrations. Mismatches between simulated and observed variograms are analysed as (i) wrong quantification of inputs to the river and (ii) wrong description of physical processes within the river.

Keywords : Continental Hydrosystems, Water Resources, Modelling, Hydrology, Hydrogeology, Biogeochemistry, Hydrogeophysics, Geostatistics

Remerciements

Mes plus sincères remerciements vont à Ghislain de Marsily et Patrick Goblet pour m’avoir soutenu et encouragé dans l’écriture de ce mémoire d’HDR. En tant que responsable de l’équipe Systèmes Hydrologiques et Réservoirs du Centre de Géosciences de MINES Paris-Tech, Patrick Goblet m’a aussi fait confiance et conseillé pour développer mon projet de recherche sur les interfaces nappe-rivière. Jean-Marie Mouchel a adopté une attitude similaire en introduisant cette thématique comme un des axes de recherche principaux du programme de recherche PIREN Seine. Pour leur soutien et leurs conseils éclairés, je tiens à leur exprimer toute ma reconnaissance. Je souhaite aussi remercier les membres du jury pour avoir accepté de lire et juger ce mémoire, ainsi que pour leurs retours positifs et les échanges passionnants qui ont eu lieu lors de la soutenance.

Les travaux développés ici n’auraient pas vu le jour sans l’enthousiasme et la pertinence des post-doctorants, thésards et étudiants de deuxième cycle universitaire avec qui j’ai eu, et ai, beaucoup de plaisir à collaborer. Mes plus chauds remerciements s’adressent donc à Bedri Kurtulus, Amer Mouhri, Alexandre Pryet, Firas Saleh, Benjamin Grappe, Baptiste Labarthe, Céline Monteil, Edwige Polus-Lefebvre, Lauriane Vilmin, Léna Abasq, Emmanuel Cocher, Marc Lotteau, Cyril Pivano et Maxime Turko. Parmi eux Lauriane Vilmin et Amer Mouhri m’ont fourni du matériel graphique qui m’a été très utile lors de la rédaction de ce mémoire. Bedri Kurtulus m’a aussi permis de faire mes armes en enseignement à l’international. Je tiens à leur exprimer toute ma gratitude. Je remercie aussi Isabelle Cojan, Chantal de Fouquet, Agnès Ducharne, Emmanuel Ledoux, Ludovic Oudin, et Michel Poulin avec qui j’ai eu le plaisir de co-encadrer les différents travaux de thèse.

Je remercie tout particulièrement l’ensemble des équipes du PIREN SEINE, dont la richesse et la diversité m’ont fourni un cadre de travail très motivant et structurant. Les nombreux événements qui nous ont fréquemment réunis au cours de ces années m’ont permis d’être plongé dans un grand nombre de projets, de bénéficier des moyens d’action d’un grand programme interdisciplinaire et tout cela dans une ambiance conviviale et agréable, dont j’aurai, je l’espère, le plaisir de faire perdurer la culture dans les années à venir. J’en profite ici pour remercier plus spécialement l’ensemble des acteurs du PIREN SEINE, scientifiques et gestionnaires, avec qui j’ai pu collaborer de manière privilégiée dans le cadre des actions :

- Interfaces nappe-rivière : Maïa Akopian, Benjamin Airaud, Patrick Ansart, Ludovic Bodet, Chantal de Fouquet, Benoît Deleplancque, Véronique Durand, Patrick Goblet, Gaghhik Hovhannissian, Anne Jost, Claudine Jost, Baptiste Labarthe, Simon Lalauze, Nicolas Le Bail, Amer Mouhri, Sylvain Pasquet, Fayçal Rejiba, Gaëlle Tallec, Quentin Vitale, Pierre Weill.
- Biogéochimie de l’Axe Fluvial (incluant le projet CARBOSEINE financé par R2DS Île-de-France) : Lionel Benard, Gilles Billen, Chantal de Fouquet, Nicolas Escoffier, Josette Garnier, Alexis Groleau, Bastien Laborie, Annet Lavermann, Jean-Marie Mouchel, Catherine Paffoni, Michel Poulin, Mélanie Raimonet, Vincent Rocher, Pierre Servais, Gilles Varault, Lauriane Vilmin, Eric Viollier.
- Sciences et SAGE : Nicolas Becu, Catherine Carré, Amandine de Coninck, Sonia Decker, José-Frédéric Deroubaix, Jean-Paul Haghe, Jean-Marie Mouchel, Cyril Pivano, Gaëlle Tallec.

Mes remerciements vont aussi à mes collègues du Centre de Géosciences avec qui j’ai eu le plaisir de collaborer sur des sujets divers et variés comme la modélisation biogéochimique,

l'hydrogéologie, l'hydrologie, la géostatistique, la géomorphologie, sans oublier les enseignements. Plus spécifiquement je remercie les membres de l'équipe Systèmes Hydrologiques et Réservoirs dans laquelle j'ai été accueilli à mon arrivée au Centre : Patrick Goblet, Michel Poulin, Emmanuel Ledoux, Dominique Bruel, Elizabeth Cordier, Florence Habets, Pascal Viennot, et Dominique Vassiliadis. Au cours de mon parcours d'enseignements, Isabelle Cojan m'a permis de participer activement à la formation des Ingénieurs du Corps Technique de l'Etat. Cette formation sur les systèmes complexes abordés sous l'angle de la géologie et de la sociologie a été l'occasion de découvrir d'autres formes de pensée. Pour ses conseils éclairés sur ces sujets, mes remerciements vont aussi à Olivier Fournout.

Pour mener à bien certains travaux, de nombreuses missions de terrain en hydro-géophysique ont été nécessaires. Elles ont permis de développer une collaboration très constructive avec l'UMR 7619 Sisyphe, et plus particulièrement avec Fayçal Rejiba et Ludovic Bodet. Je tiens à les remercier pour leur soutien, la pertinence de leur approche et nos discussions toujours fort animées. La mise en place du GIS ORACLE sur les deux Morin (incluant le bassin de l'Orgeval) sous l'impulsion de l'Irstea, et l'encouragement d'actions de recherche entre jeunes chercheurs par la FIRE (Fédération de Recherche en Environnement, FR 3020 CNRS/UPMC) ont indéniablement favorisé l'aboutissement de ce projet. Pour leur soutien et leur implication jusque sur le terrain, je remercie Gaëlle Tallec et Josette Garnier, respectivement pour chacune de ces deux structures. Ces actions de recherche ont aussi pu voir le jour grâce au soutien financier de l'ONEMA via le projet NAPROM (NAPpe-Rivière Observation Modélisation). L'ensemble des discussions que nous avons eu lors des rencontres avec les membres du projet NAPROM ont permis de faire avancer une partie des travaux exposés dans ce mémoire. Pour cela merci à Florent Artaud, Bénédicte Augeard, Marion Chatellier, Olivier Douez, Didier Graillot, Florence Habets, Eric Lalot, Pierre Marmonier, Pascal Maugis, Amer Mouhri, Frédéric Paran, Christophe Piscart, Fayçal Rejiba, Jean-Pierre Vergnes.

Pour finir, je remercie mes proches, et plus particulièrement Colette Oudart-Flipo, Alain Flipo, et Angela Armakola, dont le soutien indéfectible m'a été précieux au cours des dernières années.

Table des matières

Table des matières	ix
Table des figures	xiii
Liste des tableaux	xv
1 Introduction	2
1.1 Les enjeux de la gestion de la ressource en eau	2
1.2 Hydrosystème et Anthroposystème	3
1.3 Structure du mémoire	5
1.3.1 Modélisation quantitative des hydrosystèmes continentaux	6
1.3.2 Hydrologie des interfaces nappe-rivière	6
1.3.3 Modélisation de l'impact de l'anthropisation sur la qualité des eaux	7
2 Modélisation quantitative des hydrosystèmes continentaux	10
2.1 L'observation des hydrosystèmes continentaux : métrologie et interpolation	10
2.1.1 Les données hydrologiques	10
2.1.2 L'interpolation piézométrique - Application au bassin de l'Orgeval	11
2.1.2.1 Les jeux de données	11
2.1.2.2 Interpolation à l'aide de la géostatistique	11
2.1.2.3 GEO-ANFIS, une possible alternative ?	14
2.2 Modélisation distribuée à base physique des hydrosystèmes continentaux	18
2.2.1 La notion de modèle	18
2.2.2 Etat de l'art des modèles mécanistes distribués	19
2.2.3 La plate-forme EauDyssée - un modèle adapté aux hydrosystèmes régionaux	22
2.3 Ajustement des modèles	24
2.3.1 Assumer et contourner l'équifinalité	24
2.3.2 Le problème inverse en hydrogéologie	26
2.3.3 Développement d'une méthodologie hybride d'ajustement	29
2.3.3.1 Éviter la sur-paramétrisation : Calibration, test et validation	29
2.3.3.2 Calibration en boucles imbriquées	30
2.4 Modélisation du bassin de la Loire	34
2.4.1 Brève description du bassin et conceptualisation du modèle	34
2.4.2 Les forcages du modèle	36
2.4.3 Ajustement du modèle	36
2.4.4 Fonctionnement hydrologique du bassin	38

2.5	Résumé et Conclusion	40
3	Hydrologie des interfaces nappe-rivière	42
3.1	Retour sur le concept d'hydrosystème	42
3.1.1	Hydrosystèmes et interfaces emboîtées	42
3.1.2	Transmission des signaux hydrologiques au sein des hydrosystèmes . .	43
3.2	Conceptualisation des interfaces nappe-rivière à différentes échelles	44
3.2.1	Un problème multi-échelle structuré autour de l'échelle intermédiaire - La rivière	45
3.2.2	L'interface nappe-rivière à l'échelle locale - La Zone Hyporhéique . . .	47
3.2.3	Les interfaces nappe-rivière à l'échelle régionale - Les plaines alluviales	49
3.2.4	Modélisation des interfaces nappe-rivière : coupler les eaux de surface et souterraines	51
3.2.5	Stratégie d'étude des interfaces nappe-rivière - Exemple du bassin de la Seine	52
3.3	Déploiement d'un dispositif de mesure multi-échelle des interfaces nappe-rivière	53
3.3.1	Les méthodes d'échantillonnage	53
3.3.2	Les échelles spatiales d'échantillonnage	55
3.3.3	Méthode d'implantation du dispositif du bassin des Avenelles	57
3.4	Modélisation des interfaces nappe-rivière à l'échelle régionale	60
3.4.1	Estimation de la contribution des principaux aquifères aux débits d'étiage de la Loire	60
3.4.2	Impact de la fluctuation des niveaux d'eau en rivière sur les échanges nappe-rivière - le bassin de l'Oise	61
3.5	Résumé et Conclusion	66
4	Modélisation de l'impact de l'anthropisation sur la qualité des eaux	68
4.1	Typologie des pollutions et modélisation hydro-écologique	68
4.1.1	Pollutions ponctuelles <i>versus</i> pollutions diffuses	69
4.1.2	Paradigme d'unicité et de continuité du fonctionnement écologique . .	69
4.1.3	Modélisation de la qualité de l'eau en rivière	70
4.2	Les dynamiques hydro-sédimentaires en rivière	71
4.2.1	Modélisation de la Seine à l'aide de PROSE	71
4.2.2	Mise en cohérence des jeux de données	71
4.2.3	Calibration des processus hydro-sédimentaires	73
4.2.4	L'adsorption du phosphore	74
4.2.5	La complexité des processus benthiques	75
4.2.5.1	Accumulation des vases	75
4.2.5.2	Masse critique de sédiments	76
4.3	Le cycle de l'azote	77
4.3.1	Quantification de l'élimination de l'azote dans les bassins amont . . .	78
4.3.1.1	Exemple du Grand Morin	78
4.3.1.2	Les interfaces nappe-rivière : un moteur de transformation de l'azote	82
4.3.2	Les nitrates en Seine - Utilisation du modèle linéaire de co-régionalisation	83
4.3.3	Rôle des vases dans la biogéochimie de l'azote	87
4.4	Résumé et Conclusion	88

5 Conclusion et perspectives	90
5.1 Bilan des recherches	90
5.2 Perspectives de recherche	92
5.2.1 Les attendus de la mesure haute fréquence	92
5.2.2 Modélisation multi-échelle des interfaces nappe-rivière	93
5.2.3 Développements méthodologiques et numériques	94
A La plate-forme de modélisation des hydrosystèmes - EauDyssée	96
A.1 Le bilan de surface	96
A.2 Module de bilan hydrique de surface	96
A.3 Module de routage sur les versants	97
A.3.1 L'isochronisme	97
A.3.2 Définition des zones isochrones	98
A.4 Module de routage en rivière	99
A.5 Module de transfert en zone non-saturée	99
A.6 Module des écoulements en aquifères	100
A.7 Échanges nappe-surface	101
B Le modèle linéaire de co-régionalisation : un outil de comparaison de simulations aux observations	104
B.1 Décomposition linéaire des observations (O) et simulations (S)	104
B.2 Relation entre les n canaux de O et S	105
B.3 Interprétation des relations entre O et S	106
C Le modèle hydroécologique ProSe - version 3.6.5	108
C.1 Le module hydraulique - équations de Saint-Venant	108
C.2 Transport	111
C.2.1 L'advection	112
C.2.2 La dispersion	112
C.3 La biogéochimie en rivière - adaptation du modèle RIVE	113
C.3.1 Les producteurs primaires	116
C.3.2 Les bactéries hétérotrophes et la matière organique	117
C.3.3 Les bactéries nitrifiantes	117
C.3.4 L'ammoniaque	118
C.3.5 Les nitrates	118
C.3.6 Le phosphore	118
C.3.7 L'oxygène	119
C.3.8 La notion de filiations	120
C.4 Echanges colonne d'eau-benthos	121
C.4.1 Echanges de la phase dissoute	122
C.4.2 Echanges particulières	123
C.4.2.1 Sédimentation, érosion	123
C.4.2.2 Les pertes du périphyton en régime hydraulique stable	124
C.4.2.3 L'arrachage	125
C.4.3 Résolution des équations biologiques	126
D Sélection d'articles publiés ou soumis	128

D.1	Flipo et al. (2012) Hybrid fitting of a hydrosystem model : long term insight into the beauce aquifer functioning (France). Water Resour. Res. 48, W05509	128
D.2	Kurtulus and Flipo (2012) Hydraulic head interpolation using ANFIS - Model selection and sensitivity analysis. Computers and Geosciences 38(1), 43–51 . .	150
D.3	Saleh et al. (2011) Modeling the impact of in-stream water level fluctuations on stream-aquifer interactions at the regional scale. Journal of Hydrology 400(3-4), 490–500.	160
D.4	Flipo et al. (2007c) Modelling nitrate fluxes at the catchment scale using the integrated tool CaWaQS. Sci Total Environ 375, 69–79	172
D.5	Polus et al. (2011) Geostatistics for assessing the efficiency of distributed physically-based water quality model. Application to nitrates in the Seine River. Hydrological Processes 25(2), 217–233	184

Bibliographie	202
----------------------	------------

Table des figures

1.1	Échelles spatio-temporelles d'occurrence des phénomènes.	4
2.1	Géologie du bassin de l'Orgeval. D'après Mouhri et al. (2012a)	12
2.2	Modèles de variogrammes ajustés pour les quatre campagnes snapshot. D'après Mouhri et al. (2012a).	13
2.3	Cartes piézométriques des Hautes et Basses eaux 2009. D'après Mouhri et al. (2012a).	15
2.4	Architecture ANFIS à deux entrées. D'après Kurtulus and Flipo (2012).	16
2.5	Méthode de sélection d'un intepolateur ANFIS. D'après Kurtulus and Flipo (2012).	17
2.6	Carte piézométrique moyenne. D'après Flipo and Kurtulus (2011).	18
2.7	Distribution des écart-types associés à l'estimateur GEO-ANFIS. D'après Flipo and Kurtulus (2011).	18
2.8	Structure de EauDyssée. D'après Flipo et al. (2012)	23
2.9	Exemple de courbes d'apprentissage : Calibration et Test simultanés	30
2.10	Méthode hybride de calibration en boucles imbriquées. D'après Flipo et al. (2012).	31
2.11	Algorithme d'inversion par estimation successive des flux. D'après Pasquier and Marcotte (2006) adapté par Lotteau (2010); Monteil (2011)	33
2.12	Conceptualisation du modèle distribué de la Loire. D'après Monteil (2011).	35
2.13	Ajustement du modèle Loire - Évolution des RMSE par aquifère au cours du calage. D'après Monteil (2011).	38
2.14	Bilan du fonctionnement hydrologique de la Loire. D'après Monteil (2011).	39
3.1	Décomposition de l'hydrosystème autour des interfaces continentales constituées d'objets emboîtés. D'après Flipo (2012)	43
3.2	Différentes configurations de la ZH. D'après Malard et al. (2002).	48
3.3	Stratégie d'étude des échanges nappe-rivière. ^{1,2} Échelles définies par Blöschl and Sivapalan (1995).	53
3.4	Description des interfaces nappe-rivière mises en contexte de la structure géologique du Bassin parisien.	54
3.5	Méthodes d'échantillonnage des échanges nappe-rivière. D'après Kalbus et al. (2006) complété par Mouhri et al. (2012b).	55
3.6	Caractérisation de l'interface nappe-rivière du bassin des Avenelles à l'aide de tomographies de résistivités électriques 2D. D'après Mouhri et al. (2013a).	58
3.7	Dispositif d'échantillonnage des échanges nappe-rivière à l'échelle locale. D'après Mouhri et al. (2013a)	59
3.8	Estimation des débits moyens annuels échangés entre la Loire et ses aquifères (1975-2009). D'après (Monteil, 2011).	62

3.9	Méthodologie de Changement d'échelle basée sur l'implémentation de courbes de tarage dans EauDyssée. D'après Saleh et al. (2011).	63
3.10	Fluctuations piézométriques observée et simulées avec et sans niveaux d'eau en rivière variables. D'après Saleh et al. (2011).	64
3.11	Variogrammes expérimentaux simples et croisés des simulations et observations des charges piézométriques à Précy sur Oise. À gauche en considérant une charge fixe en rivière ; à droite en simulant explicitement les fluctuations des niveaux d'eau en rivière.	65
4.1	Caractéristiques du linéaire de Seine modélisé. D'après (Polus et al., 2011; Vilmin et al., 2012b)	71
4.2	Co-krigeage de la condition limite amont de matières en suspension à Choisy-sur-Seine en 2008. D'après (Vilmin et al., 2012b).	72
4.3	Ajustement des paramètres hydro-sédimentaires. Biais et RMSE. D'après Vilmin et al. (2012b).	73
4.4	Simulation des orthophosphates en Seine. D'après Vilmin et al. (2012b).	74
4.5	Épaisseurs de vase simulées. D'après Vilmin et al. (2012b)	75
4.6	Epaisseurs de vase et concentrations en orthophosphates simulées à Suresnes entre le 1 ^{er} et le 30 juin 2007. D'après Vilmin et al. (2012b).	76
4.7	Le Grand Morin dans son contexte géologique. D'après Flipo et al. (2007c)	79
4.8	Comparaison des distributions spatiales de nitrates en aquifère, estimées par krigeage et simulées avec CAWAQS. D'après Flipo et al. (2007b).	80
4.9	Flux d'azote moyens sur le Grand Morin en tN.an^{-1} . D'après Flipo et al. (2007c)	81
4.10	Chroniques de nitrates mesurées et simulées aux différentes stations de contrôle. D'après Polus-Lefebvre (2010); Polus et al. (2011).	84
4.11	Variogrammes simples et croisés des chroniques de nitrates mesurées et simulées aux différentes stations de contrôle. D'après Polus-Lefebvre (2010); Polus et al. (2011).	85
4.12	Concentrations en nitrate mesurées par le SIAAP (croix bleues) et simulées avec une diffusion multipliée par 100 (ligne orange) et divisée par 100 (ligne rouge) pour l'année 2008. D'après Vilmin (2011).	87
A.1	Schématisation d'une fonction production. D'après Ledoux (1980).	97
A.2	Principe du modèle à réservoirs en cascade de Nash.	100
A.3	Schématisation de la relation nappe-rivière	102
B.1	Types de relations entre les variogrammes de O et S . a) Modèle à résidus; b) Modèle de corrélation intrinsèque; c) Modèle linéaire de co-régionalisation. Extrait de Polus et al. (2011).	106
C.1	Schéma conceptuel simplifié de PROSE. D'après Flipo et al. (2004).	109
C.2	Schéma conceptuel simplifié de RIVE.	113
C.3	Structures relatives aux filiations entre espèces dans RIVE. D'après Vilmin (2011)	120
C.4	Caractérisation de l'arrachage à partir de l'hydrogramme de crue. D'après Flipo et al. (2004).	125

Liste des tableaux

2.1	Nombre de données par jeu de données et modèles de variogramme ajustés. HE : hautes eaux, BE : basses eaux, extrait de Mouhri et al. (2013a)	12
2.2	MMD couplés surface-souterrain	21
2.3	Méthodes d'inversion en hydrogéologie. D'après Flipo et al. (2012)	27
2.4	Ajustement du modèle linéaire de co-régionalisation pour chaque composante du cycle de l'eau de l'hydrosystème Loire. D'après (Monteil, 2011).	40
3.1	Modélisations des échanges nappe-rivière à base physique	46
3.2	Autres MMD aux échelles intermédiaires et régionales - Compléments à la Tab. 2.2, p.21.	50
3.3	Revue d'études de terrain sur la quantification des échanges nappe-rivière. D'après Mouhri et al. (2013a).	56
3.4	Ajustement du modèle linéaire de co-régionalisation au piézomètre de Précy-sur-Oise - Impact des échanges nappe-rivière sur les fluctuations piézométriques.	65
C.1	Notations utilisées pour l'hydraulique de PROSE	109
C.2	Variables de PROSE décrivant de transport	111
C.3	Paramètres biologiques de RIVE.	115
C.4	Notations utilisées pour les échanges eau-benthos de PROSE.	122

Chapitre 1

Introduction

1.1 Les enjeux de la gestion de la ressource en eau

Du fait des évolutions climatique et démographique rapides, la gestion de la ressource en eau par les sociétés humaines constitue un des défis majeurs du XXI^{ème} siècle. Aujourd'hui, les réserves planétaires en eau sont réparties en eaux marines (97,2%), neiges et glaces (2,2%), eaux souterraines (0,6%), eaux douces de surface (0,02%) et eau atmosphérique (0,001%). Les eaux douces propres à la consommation humaine ne représentent donc que 3 % des ressources disponibles en eau (de Marsily, 1995; Roche and Zimmer, 2006). De plus, une partie importante de ce stock est difficile d'accès car elle est constituée de réserves très profondes et de glace. Au total, moins de 1 % des réserves planétaires est à la disposition de l'humanité, et 12 000 km³ sont considérés renouvelables et utilisables (Roche and Zimmer, 2006), avec une incertitude d'au moins 20 % associée à ces estimations.

Chaque année, environ 4 000 km³ de ces eaux sont prélevés, dont la moitié est consommée par les sociétés humaines (de Marsily, 2008; Roche and Zimmer, 2006). Cette consommation est répartie en trois principaux types d'usages : 3% pour l'usage domestique dont l'approvisionnement en eau potable, 5% pour les besoins industriels et 92% pour l'irrigation agricole. À ces 2 000 km³ consommés par les activités humaines, s'ajoutent 200 km³ évaporés au niveau des surfaces libres des barrages, ainsi que les pertes de réfrigérants atmosphériques des centrales nucléaires, dont la quantification est peu aisée vue l'opacité régnant autour de cette activité. En Europe, environ 75 % de l'eau potable est prélevée dans les eaux souterraines, l'exemple le plus extrême étant le Danemark qui prélève 100 % de son eau potable dans les aquifères (Jorgensen and Stockmarr, 2009). Outre une très mauvaise répartition des stocks, la croissance démographique devrait induire une augmentation de la demande en eau d'environ 25 % d'ici 2050 (de Marsily, 2008). À cela s'ajoute l'expansion économique qui fait peser de lourdes menaces sur la quantité disponible et la qualité de l'eau. La pression anthropique sur les eaux souterraines est tellement forte, que certains auteurs indiquent qu'il faudrait considérer, dans certaines régions sèches du globe, l'eau comme une ressource minérale et non pas renouvelable (Kalf and Woolley, 2005). De plus, le réchauffement climatique devrait s'accompagner d'une augmentation des besoins en eau, à la fois de la végétation (augmentation de la demande évaporative), et des villes (pour le refroidissement), qui ne sera pas forcément compensée par une augmentation des précipitations. Ainsi, la tension sur la ressource en eau risque d'être exacerbée dans de nombreuses régions de la planète.

Dès lors, il apparaît fondamental d'être à même d'estimer l'impact des prélèvements en eau

sur la ressource afin de pouvoir la préserver sur le long terme. Les concepts d'hydrosystème et d'anthroposystème peuvent servir de point d'ancrage pour étudier cette problématique qui constitue un aspect fondamental de la relation homme-territoire, l'eau étant la condition *sine qua non* à ce que nous appelons la vie.

1.2 Hydrosystème et Anthroposystème

Un hydrosystème au sens large est un système complexe dont le fonctionnement est contrôlé par les circulations d'eau dans tous ses états liquide, solide, gazeux. La notion de système implique un principe d'existence propre du tout différent de la somme de ses parties. Le principe d'existence ne nécessite cependant pas forcément un principe identitaire (Morin, 2008). Une vision plus orientée vers le domaine spatial et le milieu définit un hydrosystème continental comme une *"portion de l'espace où, dans les trois dimensions, sont superposés les milieux de l'atmosphère, de la surface du sol et du sous-sol, à travers lesquels les flux hydriques sont soumis à des modes particuliers de circulation. L'hydrosystème est le siège, sous l'effet de l'eau, de transformations car, en toutes ses phases, le cycle de l'eau a d'étroits rapports avec d'autres cycles physiques, géochimiques et biologiques de l'environnement terrestre"* (Dacharry, 1993; Kurtulus et al., 2011; Flipo et al., 2012).

Contrairement à l'hydrosystème, l'anthroposystème inclut un système de valeurs artificialistes liées d'une part à la structuration des relations sociales mais aussi à un système de pensée abstrait, qui idéalement tente de synthétiser les observations/informations/interprétations visant à la compréhension du cadre de vie. C'est l'anthroposystème dans son ensemble qui établit la notion de faisabilité, de capacité d'actions par le biais d'une codification sous forme de droit encadré par des lois. Reprenant la notion d'hydrosystème au sens large, un individu peut être vu comme un hydrosystème constitutif de l'anthroposystème. Finalement l'hydrosystème est une condition nécessaire d'existence de l'anthroposystème, l'anthroposystème n'étant pas une condition nécessaire d'existence de l'hydrosystème (Dooge, 1983). La notion d'hydrosystème se trouve donc être une notion englobante pour ce qui concerne les sphères biologique, écosystémique et par conséquent sociologique (Fig 1.1 qui introduit les échelles spatio-temporelles de validité du concept d'hydrosystème d'après les classifications de Biancamaria et al. (2012); Blöschl and Sivapalan (1995); Klemes (1983)). Allant dans ce sens, Kolditz et al. (2007) mentionnent ainsi que les processus hydrologiques incluent non seulement l'hydro et la géosphère, mais aussi les processus biologiques et atmosphériques (Dooge, 1968, 1983). Dès lors, il apparaît que la gestion durable de la ressource en eau n'est pas qu'un simple problème économique ou environnemental, mais concerne avant tout notre survie en tant qu'espèce vivante.

L'analyse d'un hydrosystème continental¹ s'appuie sur deux aspects, l'un quantitatif (gestion des stocks d'eau disponibles) et l'autre qualitatif (pollutions de la ressource). Chacun de ces deux aspects est influencé par deux composantes : naturelle (le contexte) et anthropique (perturbation du contexte par les activités humaines). La compréhension du fonctionnement de l'hydrosystème peut aussi se décliner en plusieurs problématiques liées à ces deux composantes. La première consiste en la compréhension du fonctionnement physique du milieu aussi bien en termes de quantité disponible (prévision des cycles hydrologiques, genèse des précipitations,...) que de mobilité dans le milieu terrestre (hydraulique, hydrogéologie, écoulement dans la zone non saturée du sol, échanges sol-atmosphère, ruissellement de surface, écoulements karstiques, en milieu fissuré). La composante anthropique revêt de multiples visages

1. Un hydrosystème continental couvre les gammes d'échelles de l'hydrologie et planétaire (Fig 1.1).

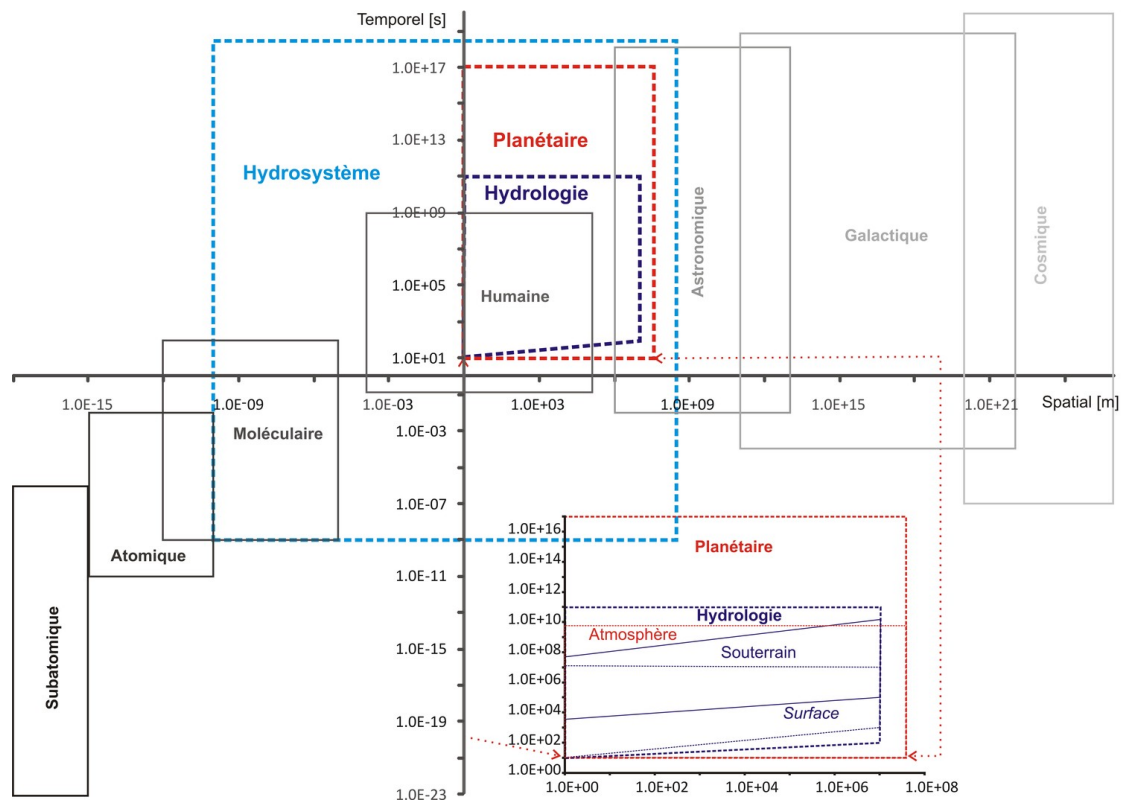


FIGURE 1.1: Échelles spatio-temporelles d'occurrence des phénomènes.

qui définissent la gestion de l'eau, une fois le cadre naturel établi. Ces contraintes sont à la fois techniques (impacts des constructions humaines sur le milieu), économiques (contraintes exercées sur le milieu par les activités économiques aussi bien en terme de prélèvements que de rejets toxiques) et sociales (politique de gestion de l'eau, influence des politiques, vision de l'eau par les riverains). Les deux composantes fondamentales de l'hydrosystème ne sont pas complètement indépendantes (Dooge, 1984). C'est ainsi que l'activité humaine est suspectée d'avoir une influence sur le cycle hydrologique via l'émission de gaz à effet de serre, le réchauffement climatique, ou encore la modification des chemins d'écoulement (Carluer and de Marsily, 2004; Dunn and Ferrier, 1999). Cette influence humaine peut même parfois prendre le pas sur les moteurs naturels (Tockner et al., 2010; Wagener et al., 2010). Quant à la nature, elle influence les comportements humains par le biais des catastrophes naturelles. Les mesures prises par l'Homme en vue de lutter contre ces catastrophes naturelles peuvent alors avoir un impact sur la qualité de l'eau et sur la biodiversité des milieux (construction de barrages écrêteurs de crue, de digues pour protéger les villes des inondations, etc.)

Il n'est pas nouveau de constater que la gestion du milieu naturel est liée à l'anthroposystème par le biais de grandes orientations sociales, économiques et politiques. Cependant la prise de conscience de la nécessité de prendre en compte les rétroactions positives ou négatives de l'hydrosystème sur l'anthroposystème et vice versa est très récente (Wagener et al., 2010).

Ainsi, Sivapalan et al. (2012) parlent d'une nouvelle discipline scientifique, la socio-hydrologie qui a pour objectif de comprendre et d'étudier l'évolution commune des systèmes couplés

"human-water"². Par rapport à une approche intégrée de la gestion de la ressource en eau où l'anthroposystème et son évolution sont pris en compte par simple forçage (Sivapalan et al., 2012), la socio-hydrologie cherche à décrire et à prendre en compte la notion de co-évolution (Kallis, 2007; Norgaard, 2005; Winder et al., 2005) des hydrosystèmes et des anthroposystèmes. Par exemple, elle vise à décrire des dynamiques complexes comme les échanges d'eau virtuelle³ (Chapagain et al., 2006; Mekonnen and Hoekstra, 2011) au cours du temps dans le cadre d'un environnement changeant. Cette discipline s'inscrit dans la prise de conscience de l'interconnection de plus en plus importante entre anthroposystème et hydrosystème par le biais du commerce global (Billen et al., 2010; Burke et al., 2009; Grote et al., 2005).

1.3 Structure du mémoire

Sivapalan et al. (2012) ouvrent la porte à un pan nouveau de la recherche sur la gestion de la ressource en eau qui ne sera pas traité dans ce mémoire. L'ensemble des travaux présentés ici est centré sur la modélisation des hydrosystèmes continentaux comme support de la gestion durable de la ressource en eau. Ils portent sur la compréhension du cycle de l'eau, de l'impact de l'anthropisation sur la qualité des eaux (pratiques agricoles, rejets urbains) et du fonctionnement des interfaces environnementales (interactions nappe-rivière, périphyton,...). Principalement, le mémoire s'intéresse à la compréhension du transfert et de la transformation des pollutions anthropiques par la mise en oeuvre de modèles numériques spatialisés permettant de prendre en compte les composantes physiques (transferts hydriques), chimiques et biologiques des hydrosystèmes continentaux. Ainsi même si le volet social ne sera pas abordé, ces travaux s'inscrivent dans la problématique de la gestion de la ressource en eau dans un cadre dialectique homme-société-environnement. En effet, la modélisation des hydrosystèmes, grâce à sa puissance d'extrapolation, constitue le socle d'une gestion durable de la ressource et se place à l'interface entre chercheurs, gestionnaires et industriels.

Une réflexion transverse sur l'adaptation de la complexité des modèles aux données disponibles est aussi au coeur des travaux. Concrètement, cela se traduit par une réflexion sur une meilleure imbrication entre stratégies d'échantillonnage et stratégies de modélisation et par un souci permanent de quantifier les incertitudes liées aux modèles déterministes au moyen de diverses techniques faisant intervenir notamment la géostatistique qui permet de quantifier en termes de variabilité les écarts entre chroniques simulées et chroniques mesurées. Une attention particulière est portée sur la modélisation de la physique des processus, car une mauvaise simulation des flux hydriques mène à des analyses qualitatives erronées lorsque des modèles d'écoulements sont couplés avec des modèles biogéochimiques (Darracq and Destouni, 2007).

Dans ce cadre général, le mémoire d'HDR est divisé en trois parties :

1. La modélisation quantitative des hydrosystèmes continentaux
2. L'hydrologie des interfaces nappe-rivière
3. La modélisation de l'impact de l'anthropisation sur la qualité des eaux

2. humains-eau

3. L'eau virtuelle fait référence à la quantité d'eau nécessaire pour produire de la nourriture ou des produits dérivés. Cette quantité d'eau est ensuite "virtuellement" transportée sur le lieu de consommation des produits fabriqués à partir d'elle.

1.3.1 Modélisation quantitative des hydrosystèmes continentaux

Cette partie démarre avec une synthèse des méthodes permettant de caractériser l'état de la ressource en eau (la piézométrie) à l'échelle d'un petit bassin versant agricole du bassin parisien (40 km²). Les résultats de différentes méthodes d'interpolation, à base essentiellement de géostatistique et de logique floue, sont présentés pour le cas des hautes et basses eaux de ce bassin. Une discussion s'ensuit sur les avantages et inconvénients des différentes techniques.

Pour modéliser quantitativement les hydrosystèmes continentaux, une formalisation physique couplée des processus hydrologiques de surface et souterrains formalisée dans la plateforme EauDyssée est utilisée. Ce modèle permet de quantifier les volumes des différents réservoirs, les temps de résidence de l'eau et les flux d'échange entre les réservoirs. L'utilisation d'un modèle mécaniste distribué (MMD) nécessite d'ajuster un grand nombre de paramètres, ce qui pose le problème de l'équifinalité, à savoir que des jeux de paramètres différents peuvent permettre de simuler des réponses similaires du système. Ce problème a pour conséquence de questionner la fiabilité de ces modèles dans le cadre d'une utilisation prospective. Suite à une synthèse bibliographique sur les techniques d'ajustement des MMD, une méthodologie hybride d'ajustement des paramètres d'EauDyssée a été développée. Elle couple un ajustement manuel avec un ajustement automatique grâce au développement d'un module d'inversion se basant sur la méthode d'estimation par flux successifs. S'inspirant des techniques de soft computing faisant intervenir le concept de réseau neuronal, la méthodologie d'ajustement du MMD sur le temps long utilise un jeu de données supplémentaire par rapport aux approches classiques. Cela a été rendu possible grâce aux réseaux nationaux d'observation dont les données sont disponibles en ligne. Cette méthodologie a été appliquée à l'hydrosystème Loire (d'une superficie de 120 000 km²). Pour représenter la composante souterraine de l'hydrosystème Loire, trois aquifères superposés sont considérés couvrant une surface de 38 000 km² : les calcaires de Beauce, la craie séno-turonienne et les sables cénomaniens. Le modèle est calé sur une période de 10 ans, validé sur une autre période de 10 ans, puis testé sur 35 ans (1974-2009). Le modèle ajusté permet de bien simuler les débits et piézométries observés sur l'ensemble du domaine pour les 35 années avec un écart quadratique moyen de 2.86 m calculé avec 197 piézomètres et des critères de Nash aux stations en Loire tous supérieurs à 0.9 (un critère de 1 traduit le fait que le modèle reproduit parfaitement les observations). Une fois le modèle ajusté, il permet d'analyser le fonctionnement hydrologique du bassin à différentes échelles de temps. L'utilisation du modèle linéaire de co-régionalisation permet, pour les 35 années simulées, de décomposer les différents signaux hydrologiques en une somme de réponses temporelles : aléatoire à pas de temps sub-hebdomadaire et périodique de période 17.2 ans. La stationnarité de la moyenne et la nature des signaux indiquent que le système est en légère surexploitation sur le long terme.

1.3.2 Hydrologie des interfaces nappe-rivière

L'ensemble des travaux exposés précédemment impose de revenir sur le concept d'hydrosystème continental afin d'explicitier les différentes interfaces qui composent le système. Ainsi les surfaces continentales peuvent être vues comme une interface entre l'atmosphère et le milieu souterrain. Au sein de ces interfaces, nous distinguerons, le sol qui est le réceptacle des pollutions diffuses, des interfaces nappe-rivière qui correspondent à la zone de mélange entre les eaux souterraines et les eaux de surface s'écoulant vers les océans. Dans la suite de cette partie, je m'intéresse à l'interface nappe-rivière qui suscite un intérêt croissant au sein

de la communauté scientifique mais dont le fonctionnement est mal compris. Ainsi j'étudie, à différentes échelles spatiales et temporelles, la relation complexe entre les processus hydrologiques basse fréquence se développant à l'échelle des aquifères de grande extension spatiale et les processus hydrologiques haute fréquence se développant dans les cours d'eau. L'objectif de ces travaux est de mieux simuler le fonctionnement hydrologique des plaines alluviales en prenant en compte la forte anthropisation de ces systèmes et par là même de mieux estimer les pertes de polluants diffus (notamment les nitrates) qui se produisent dans ces sous systèmes hydrologiques. Tout d'abord un état de l'art des méthodes locales d'investigation du comportement de ces interfaces est dressé. L'étude de ces sous-systèmes complexes en est à ses débuts et les méthodologies de quantification des flux d'eau échangés localement entre les aquifères et les rivières restent à développer. Ainsi, je me suis attaché à développer un dispositif expérimental multi-échelle afin de quantifier ces flux localement et à l'échelle d'un système aquifère multi-couche de 40 km² en surface (sous bassin versant de l'Orgeval qui fait l'objet du GIS ORACLE). Ce dispositif original couple un réseau de piézomètres de plateau avec un système local de mesure hydrogéophysique des flux d'eau dans la zone hyporhéique. Ce système de mesure comprend un piézomètre sur chaque berge de la rivière, ainsi que deux systèmes verticaux d'échantillonnage des gradients de température et de pression sur 50 cm de profondeur. Par contre, à l'échelle d'un hydrosystème continental comme le bassin de la Seine (70 000 km²), la compréhension du fonctionnement de l'interface nappe-rivière repose essentiellement sur des approches de modélisation. Pour de tels bassins une méthodologie innovante a été mise en place. Elle consiste à extraire l'information locale synthétisant les transferts hydrologiques à l'aide d'une modélisation hydraulique fine basée sur les équations de Saint-Venant. Une fois le modèle local validé, une courbe de tarage est calculée en chaque maille du modèle hydrodynamique. L'ensemble des courbes locales est ensuite projeté comme conditions aux limites sur les mailles représentant le réseau hydrographique à plus grande échelle (modèle EauDyssée). Cette méthode de changement d'échelle permet d'obtenir un modèle robuste et peu coûteux en temps de calcul tout en tenant compte, à l'échelle régionale, des dynamiques locales. Une première utilisation de cette méthodologie à l'aval du bassin de l'Oise a permis de mieux simuler le comportement des piézomètres situés en bordure de rivière grâce à la prise en compte du battement du niveau d'eau en rivière. La différence de quantification des flux échangés entre la nappe et la rivière avec cette méthode et avec une méthode classique à côte fixe est de quelques pourcents qui modifient significativement l'estimation du contenu en eau des sols et potentiellement des flux de dénitrification aux interfaces.

1.3.3 Modélisation de l'impact de l'anthropisation sur la qualité des eaux

D'un point de vue qualitatif, l'anthropisation se caractérise par deux types d'apports, les apports diffus et ponctuels. Ces deux types d'apports modifient le cycle des éléments nutritifs à des échelles de temps très différentes. Le paradigme d'unicité et de continuité du fonctionnement hydro-écologique formulé par Vannote *et al.* (1980) a permis le développement de modèles biogéochimiques individus centrés. Ce chapitre démarre par la mise en œuvre du modèle hydro-écologique, PROSE, sur le linéaire de la Seine depuis l'amont de Paris jusqu'à l'estuaire. L'étude de l'interaction entre les processus biogéochimiques et les processus hydro-sédimentaires révèle l'importance de ces derniers dans le cycle du phosphore, via les processus d'adsorption/desorption. L'impact des stocks de vase sur l'oxygénation des eaux de surface est aussi significatif pour les rivières aval.

Le rôle joué par les interfaces devient primordial dans les têtes de bassins, où elles contrôlent

la qualité de l'eau. Pour le bassin amont du Grand Morin, la modélisation du devenir des nitrates d'origine agricole, a permis de montrer que l'azote était éliminé, dans sa grande majorité, au niveau des interfaces nappe-rivière : zones humides, nappe alluviale, zone hyporhéique, compartiment benthique des rivières.

Finalement, afin de mieux comprendre le devenir des nitrates dans les grandes rivières, la comparaison de deux cadres cognitifs (interprétation des observations et représentations des processus) a été menée à l'aide du modèle linéaire de co-régionalisation qui permet de comparer des variogrammes temporels simples et croisés des mesures et des sorties de modèles. Appliquée à la Seine, cette approche a permis d'analyser les écarts, entre modèles et mesures, associés soit à des erreurs de forçage du modèle déterministe (conditions aux limites), soit à des erreurs de formalisme des processus physiques ou/et de paramétrisation du modèle.

Le mémoire se termine sur les perspectives de recherche qui auront pour objectif de modéliser l'impact des interfaces nappe-rivière sur le cycle hydro-biogéochimique de l'eau en contexte de bassins sédimentaires. Ces recherches seront structurées autour de trois axes principaux :

- La mise en abyme temporelle des mesures hydro-biogéochimiques haute fréquence.
- Le développement d'une plate-forme de modélisation et de systèmes d'échantillonnage multi-processus et multi-échelle des hydrosystèmes continentaux.
- Le développement de méthodologies d'ajustement des modélisations multi-échelle.

Chapitre 2

Modélisation quantitative des hydrosystèmes continentaux

Matériel de référence

Ce chapitre s'appuie directement sur [Flipo et al. \(2012\)](#) (Annexe D.1, p.128) et [Kurtulus and Flipo \(2012\)](#) (Annexe D.2, p.150), ainsi que sur [Flipo and Kurtulus \(2011\)](#); [Kurtulus et al. \(2010, 2011\)](#); [Monteil et al. \(2010\)](#); [Monteil \(2011\)](#); [Mouhri et al. \(2011, 2012a, 2013b\)](#).

2.1 L'observation des hydrosystèmes continentaux : métrologie et interpolation

2.1.1 Les données hydrologiques

L'observation des hydrosystèmes continentaux a deux objectifs principaux. Il s'agit, d'une part, d'estimer spatialement l'état du système via l'interpolation de mesures ponctuelles, et, d'autre part, de comprendre l'évolution du système grâce à l'acquisition de chroniques sur le long terme avec un pas de temps donné. Ces chroniques à un pas de temps fixe ou variable peuvent aussi être ensuite interpolées pour reconstituer des périodes non mesurées. L'observation des hydrosystèmes correspond donc à deux tâches bien distinctes. La première tâche est l'acquisition et l'enregistrement de données. Il s'agit donc d'un problème de métrologie. La seconde tâche est l'interpolation spatiale et/ou temporelle des données acquises. Il s'agit alors d'un problème d'interpolation. C'est le résultat de ces deux tâches qui permet ensuite d'estimer l'état d'un système et, éventuellement, de comprendre son évolution.

Pour comprendre l'évolution d'un hydrosystème, deux enregistrements privilégiés sont utilisés : la mesure des débits ainsi que des niveaux piézométriques. Les débits servent essentiellement à décrire les processus surfaciques alors que la piézométrie permet de décrire l'évolution du domaine souterrain. Le travail de l'hydro(géo)logue consiste à relier ces deux signaux structurés au signal beaucoup plus aléatoire des précipitations qui correspond à un troisième type d'enregistrements. La caractérisation du milieu souterrain fait très fréquemment appel à la géophysique qui permet à partir de mesures électromagnétiques de reconstituer les propriétés de conduction de l'électricité. La caractérisation du milieu par la géophysique est une mesure indirecte qui pose des problèmes de métrologie et d'inversion de données.

Pour la mesure hydro(géo)logique *stricto sensu*, nous avons affaire à, d'un côté des mesures caractérisant des processus surfaciques rapides, et d'un autre côté des mesures permettant de décrire l'évolution à long terme du système. En termes de situation de crise hydrologique, les crues correspondent à la transmission d'un signal temporel haute fréquence par les processus hydrologiques de surface, alors que les étiages résultent de la transmission d'un signal temporel basse fréquence par les processus hydrologiques souterrains. La compréhension de l'évolution spatio-temporelle des étiages d'un hydrosystème est fortement contrainte par l'acquisition de données permettant de caractériser l'évolution de la ressource en eau souterraine. Un outil privilégié est l'établissement de cartes piézométriques. L'établissement de cartes piézométriques nécessite de mener des campagnes synchrones de mesure des niveaux dans les piézomètres et puits implantés dans le domaine à cartographier. Ces campagnes peuvent être menées de manière réellement synchrones pour de petits bassins comme l'Orgeval (100 km²) où trois équipes peuvent réaliser les mesures en une journée (Flipo et al., 2009; Kurtulus et al., 2010, 2011; Kurtulus and Flipo, 2012; Mouhri et al., 2011, 2012a), par contre pour de grands aquifères (1000-10 000 km²) ces mesures peuvent prendre plusieurs semaines (Calligee, 2004; Martin et al., 2009; Verley et al., 2003), voire des années pour des aquifères de très grandes extension (> 100 000 km², Tóth (2002)), ce qui introduit de l'incertitude non quantifiée dans la cartographie finale. Ces cartes piézométriques permettent, entre autres, d'initialiser des modèles d'écoulement, parfois de les calibrer, ou encore servent de base de comparaison entre modélisation et observations afin de traiter le problème inverse en hydrogéologie (section 2.3.2, p.26). Ainsi les cartes piézométriques constituent un élément fondamental de la chaîne d'outils de gestion de la ressource en eau que sont les modèles.

2.1.2 L'interpolation piézométrique - Application au bassin de l'Orgeval

2.1.2.1 Les jeux de données

Les travaux concernant l'interpolation piézométrique s'appuient sur des campagnes snapshot¹ menées sur le site de l'Orgeval (Fig. 2.1) afin de caractériser les hautes et basses eaux pour les années 2009 et 2011. Pour chaque campagne un jeu de données comportant des mesures de niveau dans les puits du bassin ainsi que les mesures de niveau dans les piézomètres a été constitué (Tab. 2.1).

2.1.2.2 Interpolation à l'aide de la géostatistique

L'interpolation des mesures de piézométrie est très souvent réalisée à l'aide de la géostatistique (Matheron, 1978; Journel, 1986; Chilès and Delfiner, 1999), et notamment du krigeage (Abedini et al., 2008; Ahmadi and Sedghamiz, 2007; Brochu and Marcotte, 2003; Buchanan and Triantafilis, 2009; Cressie, 1990; Lyon et al., 2006; Pardo-Igúzquiza et al., 2009; Rouhani and Myers, 1990; Renard and Jeannée, 2008; Ta'any et al., 2009; Sun et al., 2009; Theodosiou and Latinopoulos, 2006; Weber and Englung, 1994; Zimmerman et al., 1999). Très peu d'études ont comparé l'efficacité des différentes techniques offertes par la géostatistique (Ahmadi and Sedghamiz, 2008; Boezio et al., 2006; Hoeksema et al., 1989; Pardo-Igúzquiza and Chica-Olmo, 2007). Cependant il semblerait que, pour des aquifères non confinés, le krigeage

1. Anglicisme qui signifie un instantané. Campagne snapshot est utilisé dans ce document comme synonyme de campagne de mesure synchrone des niveaux d'eau.

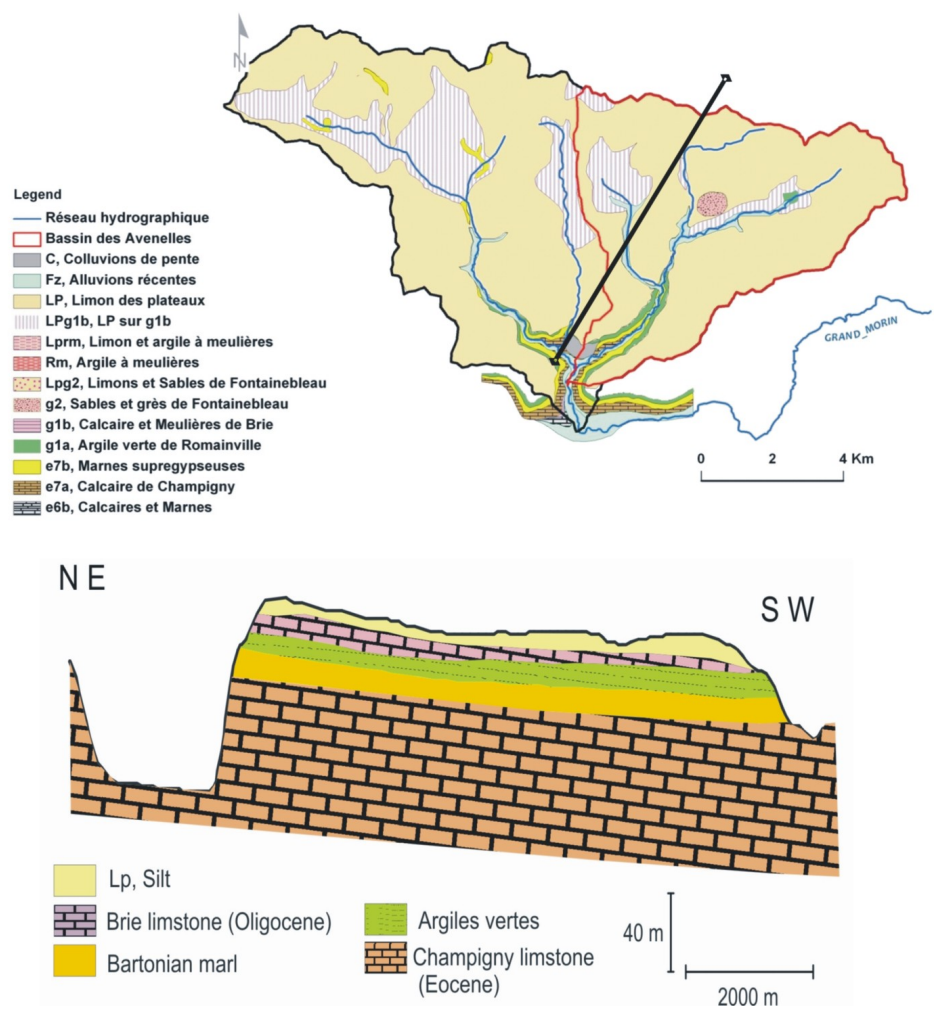


FIGURE 2.1: Géologie du bassin de l'Orgeval. D'après Mouhri et al. (2012a)

		HE 2009	BE 2009	HE 2011	BE 2011
Puits		41	51	32	49
Piezomètres		7	7	5	4
total		48	58	37	53
effet de pépité	palier [m ²]	1.13	0.345	0.9	0.4
sphérique 1	palier [m ²]	0.07	0.49	0.01	0.7
sphérique 1	portée [km]	2	2	2	2
sphérique 2	palier [m ²]	0.4	2.16	1	1.29
sphérique 2	portée [km]	7	7	7	7

TABLE 2.1: Nombre de données par jeu de données et modèles de variogramme ajustés. HE : hautes eaux, BE : basses eaux, extrait de Mouhri et al. (2013a)

avec un MNT² en dérive externe³ soit le plus adapté (Desbarats et al., 2002; Rivest et al., 2008). Cela est parfaitement en accord avec le fait que la surface piézométrique soit corrélée à la surface du sol dans le cas de nappe libre (Tóth, 1962). Une hypothèse de similarité entre le gradient topographique (de la surface du sol) et le gradient de la surface libre a aussi été formulée à l'origine de TOPMODEL (Beven and Kirby, 1979; Beven and Freer, 2001; Lamb et al., 1998), qui est l'un des modèles hydrologiques les plus utilisés. Cette hypothèse a ensuite été levée par Quinn et al. (1991), comme indiqué par Ducharne (2009).

L'interpolation des données piézométriques a été réalisée en krigeant la profondeur de la surface piézométrique par rapport à la surface du sol. Pour une meilleure lisibilité, cette variable est appelée profondeur d'eau par la suite. Cette démarche a été adoptée afin de réduire les erreurs d'estimation car, d'une part, la piézométrie dans cette région est de l'ordre de 100m alors que la profondeur d'eau est de l'ordre de 1m, et, d'autre part, la piézométrie n'est pas une variable stationnaire, ce qui implique une dérive dans le variogramme et donc potentiellement des variances d'estimation plus importantes à grande distance.

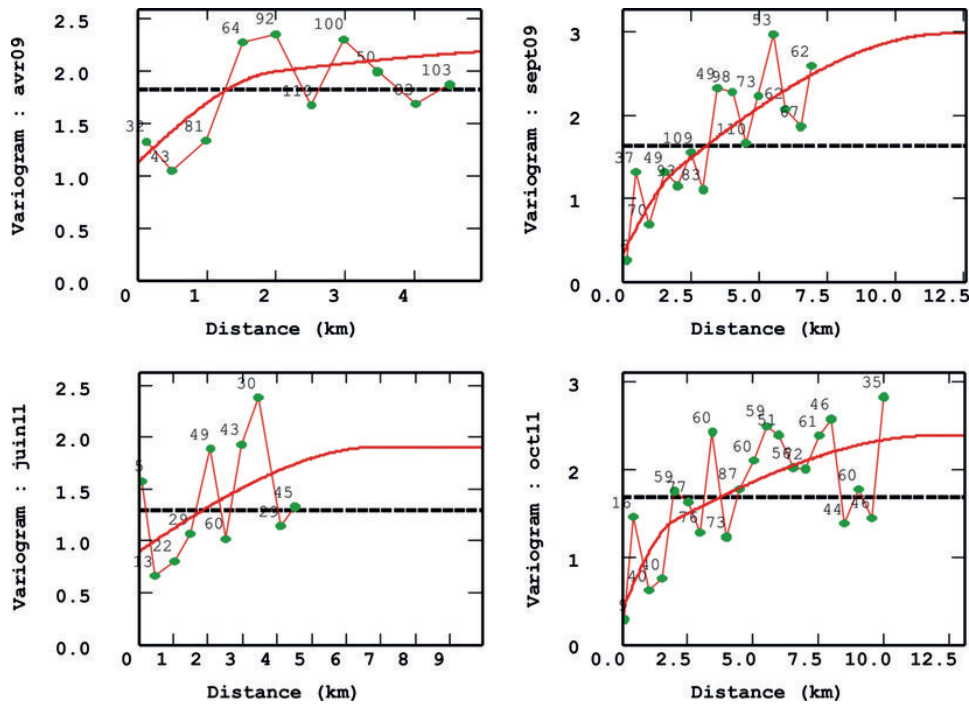


FIGURE 2.2: Modèles de variogrammes ajustés pour les quatre campagnes snapshot. D'après Mouhri et al. (2012a).

Tout d'abord les modèles de variogramme ont été ajustés aux quatre nuages variographiques résultant des quatre campagnes (Tab. 2.1 & Fig. 2.2). Les variogrammes ont été considérés isotropes car aucune anisotropie n'a été détectée lors d'une analyse préliminaire des données.

2. Modèle Numérique de Terrain

3. Le krigeage en dérive externe utilise une variable secondaire pour spatialement moduler l'espérance de la variable primaire

Une validation croisée a été réalisée avant d'entreprendre le krigeage, afin de fournir des critères statistiques de sélection dans le choix d'un modèle de variogramme et du voisinage utilisé pour le krigeage. Le principe est d'éliminer à tour de rôle chaque observation (1 mesure de la nappe) et de l'estimer à l'aide de ses voisins. En chaque point, on obtient une valeur vraie (Z_i) et une valeur estimée (Z_i^*) que l'on peut comparer pour déterminer si le modèle fournit des estimations se comportant comme prévu, et si le voisinage utilisé est adéquat. Les différents critères utilisés (moyenne et variance de l'erreur d'estimation, moyenne et variance de l'erreur standardisée) n'ont pas privilégié un voisinage en particulier (Mouhri et al., 2012a). De ce fait et par simplification, un krigeage de bloc des profondeurs d'eau avec voisinage unique a été réalisé en utilisant les modèles de variogrammes ajustés (Tab. 2.1). Afin de réaliser ce krigeage, une ligne de source virtuelle a été définie dans la partie sud-ouest du bassin où le réseau hydrographique s'écoule dans une vallée incisée qui n'est pas en contact avec l'aquifère de Brie (Fig. 2.1). Cette ligne de source virtuelle a été définie par l'intersection du MNT du toit des argiles vertes (100*100 m) avec les MNT à 25 m de la surface du sol fourni par l'IGN et régularisé sur un voisinage circulaire de 250 m. Finalement les cartes piézométriques sont calculées en soustrayant, pour chaque cellule du MNT régularisé, la profondeur d'eau estimée à la cote du sol (Fig. 2.3).

Les cartes de profondeur du toit de la nappe pour les basses eaux sont marquées par un fort effet de pépité autour des grappes de puits, alors que celles des hautes eaux sont relativement lisses, à cause du nombre réduit de puits (Fig 2.3, voir Mouhri et al. (2012a) pour plus d'informations). Il est à signaler des valeurs " incohérentes " (négatives présentées en rouge Fig. 2.3) de la profondeur du toit de la nappe au niveau des vallées. Ces valeurs ne dépassant pas -40 cm, elles correspondent, en théorie, aux affleurements de la nappe de Brie. Les cartes d'écart-type d'erreur d'estimation reflètent la localisation des puits, ainsi que le forçage par la ligne de sources.

2.1.2.3 geo-anfis, une possible alternative ?

Au cours des vingt dernières années, les techniques de soft computing, et notamment les réseaux de neurones (ANN : Artificial neural network) ont connu un engouement croissant de la communauté gravitant autour des sciences hydrologiques avec plus de 500 papiers scientifiques publiés entre 1999 et 2007 (Maier et al., 2010). Il a été noté aussi qu'une méthode de soft computing à base de logique floue (Pratihari, 2008; Zadeh, 1965), ANFIS⁴ (Fig. 2.4) (Jang, 1993, 1995, 1996; Takagi and M. Sugeno, 1985; Wang et al., 2009b; Celikyilmaz and Turksen, 2009a), affichait des performances prédictives supérieures aux réseaux de neurones classiques (El-Shafie et al., 2007; Firat, 2008; Maier et al., 2010; Nayak et al., 2004; Pai et al., 2009; Wang et al., 2009b). De plus, ANFIS a été utilisée avec succès pour interpoler des niveaux piézométriques (Flipo and Kurtulus, 2011; Kholghi and Hosseini, 2009; Kurtulus et al., 2011; Kurtulus and Flipo, 2012; Lin and Chen, 2004).

Cependant les analyses de sensibilité de ces méthodes sont peu nombreuses (Kurtulus et al., 2011) car malgré l'utilisation de plus en plus courante des techniques de soft computing, la majorité d'entre-elles utilise les ANN comme des boîtes noires sans correctement décrire les pré-traitements des données, la manière de sélectionner les entrées du réseau, le choix du nombre de noeuds internes au réseau, ou encore les procédures de calage et validation du réseau (Maier and Dandy, 2000). Ainsi la sélection des sous-jeux de données (respectivement

4. Adaptive neuro-fuzzy inference system

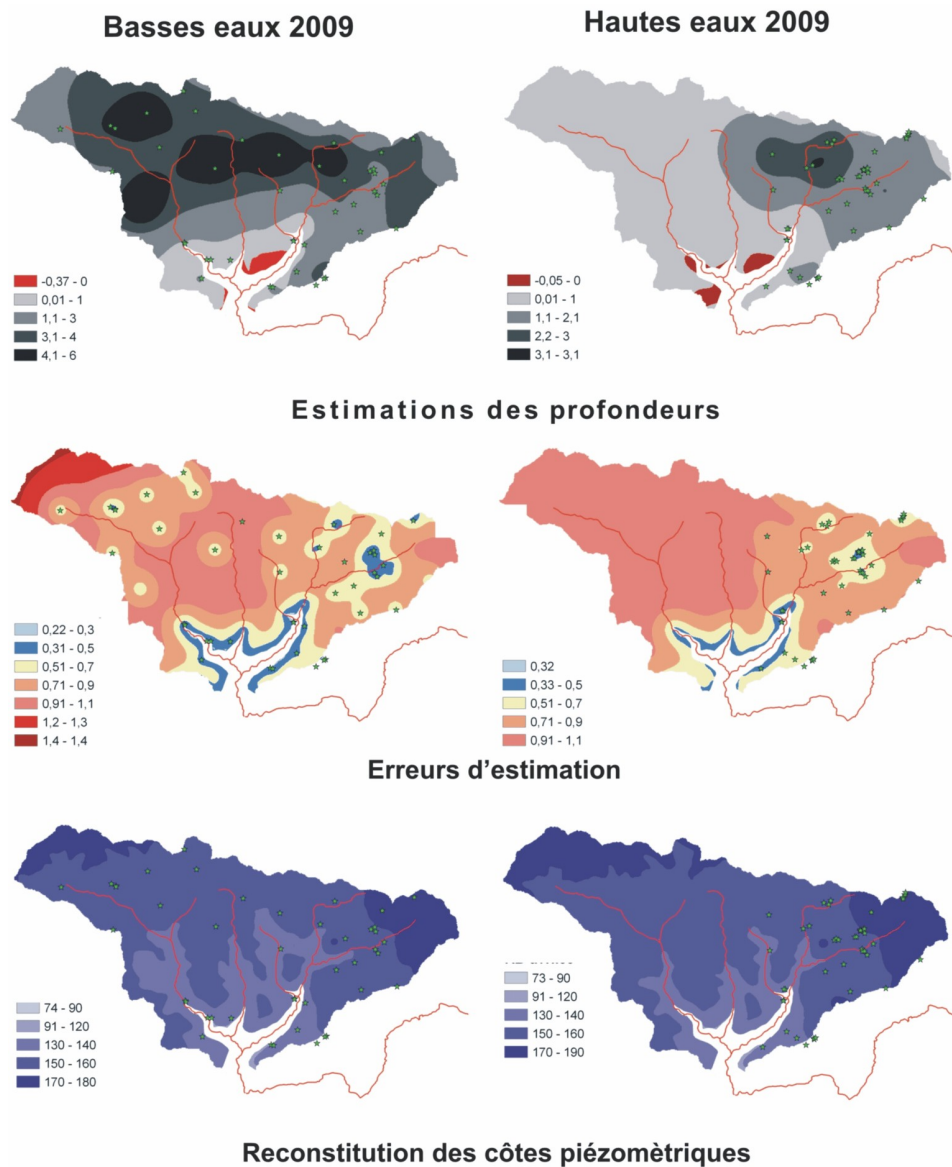


FIGURE 2.3: Cartes piézométriques des Hautes et Basses eaux 2009. D'après Mouhri et al. (2012a).

d'apprentissage, de test et de validation) est cruciale pour la mise en oeuvre de ces outils (Marcé et al., 2004; Sahoo et al., 2005; Flipo and Kurtulus, 2011). Il en est de même pour le choix des "fonctions d'appartenance"⁵ (MF) qui traduisent le degré d'appartenance à un ensemble flou (Zanchettin et al., 2005; Kurtulus and Flipo, 2012). Plus précisément une MF correspond à une distribution statistique qui caractérise le degré d'appartenance à un ensemble. Ce degré d'appartenance est une probabilité et non pas une valeur logique de type

5. Membership function en anglais

oui/non.

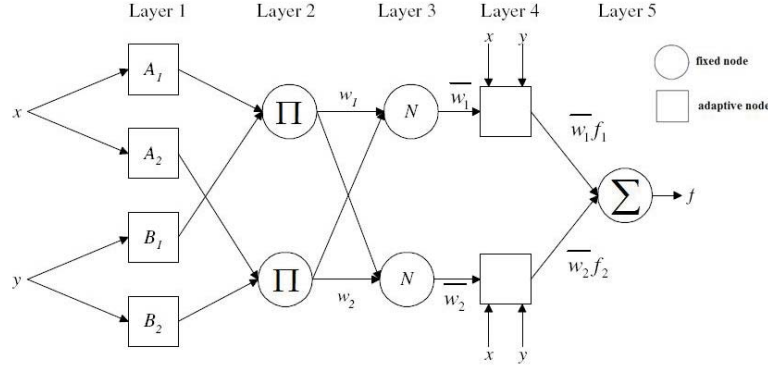


FIGURE 2.4: Architecture ANFIS à deux entrées x, y . Couche 1 : génère les poids d'appartenance en fonction de la valeur de l'entrée dans la fonction d'appartenance (Membership function, MF), équivalente à une distribution statistique. Couche 2 : génère les règles logiques sous forme de conditions IF.. THEN . Couche 3 : calcule des poids attribués à chaque règle. Couche 4 : normalisation des pondérations. Couche 5 : Calcul de la valeur finale par sommation des poids pondérés. D'après Kurtulus and Flipo (2012).

Pour mettre en œuvre ces méthodes à l'échelle d'un bassin versant, Kurtulus and Flipo (2012) ont spatialisé un modèle ANFIS sur une grille spatiale régulière. Ainsi un interpolateur ANFIS (Fig. 2.4) ayant trois entrées est associé à chaque élément de la grille. C'est cette spatialisation d'ANFIS qui constitue l'interpolateur GEO-ANFIS (Flipo and Kurtulus, 2011). Une procédure de sélection du meilleur interpolateur GEO-ANFIS a été développée pour des bassins ne présentant pas d'artésianisme (Fig. 2.5). Cette méthode comprend, dans un premier temps, une sélection de plusieurs architectures ANFIS : nombre de MF par noeud d'entrée, type de MF, ainsi que le nombre d'itérations optimal à l'apprentissage⁶. Les différentes configurations sont ensuite testées pour interpoler la piézométrie en chaque centre des éléments de la grille. Chaque interpolation est ensuite comparée au modèle numérique de terrain. L'interpolation présentant le moins d'erreurs⁷ est retenue comme référence.

Le processus de sélection du meilleur interpolateur, a aussi permis de mener une des premières études de sensibilité aux types et nombres de MF (Maier and Dandy, 2000). Cette analyse a montré que l'interpolateur est très sensible à ces deux aspects. La comparaison des études menées par Kurtulus et al. (2010) d'une part, et Flipo and Kurtulus (2011); Kurtulus and Flipo (2012) d'autre part, justifie le choix d'un interpolateur à trois entrées, et confirme que l'utilisation d'un modèle numérique de terrain permet d'améliorer significativement la qualité des interpolations piézométriques, même si l'interpolateur est très sensible à cette donnée (Kurtulus and Flipo, 2012).

Finalement GEO-ANFIS a été couplé à une procédure aléatoire de sélection des sous-jeux de données (Flipo and Kurtulus, 2011). Ce couplage permet de calculer une piézométrie moyenne et d'y associer un intervalle de confiance lié à l'interpolateur (Fig. 2.6 & 2.7). Cette méthode

6. Le nombre d'itérations optimal est déterminé au regard des performances globales de GEO-ANFIS vis-à-vis d'une fonction objectif

7. Une erreur correspond à une hauteur piézométrique supérieure à la cote du sol. Par définition de l'erreur, la procédure de sélection n'est donc pas utilisable dans le contexte d'un aquifère captif.

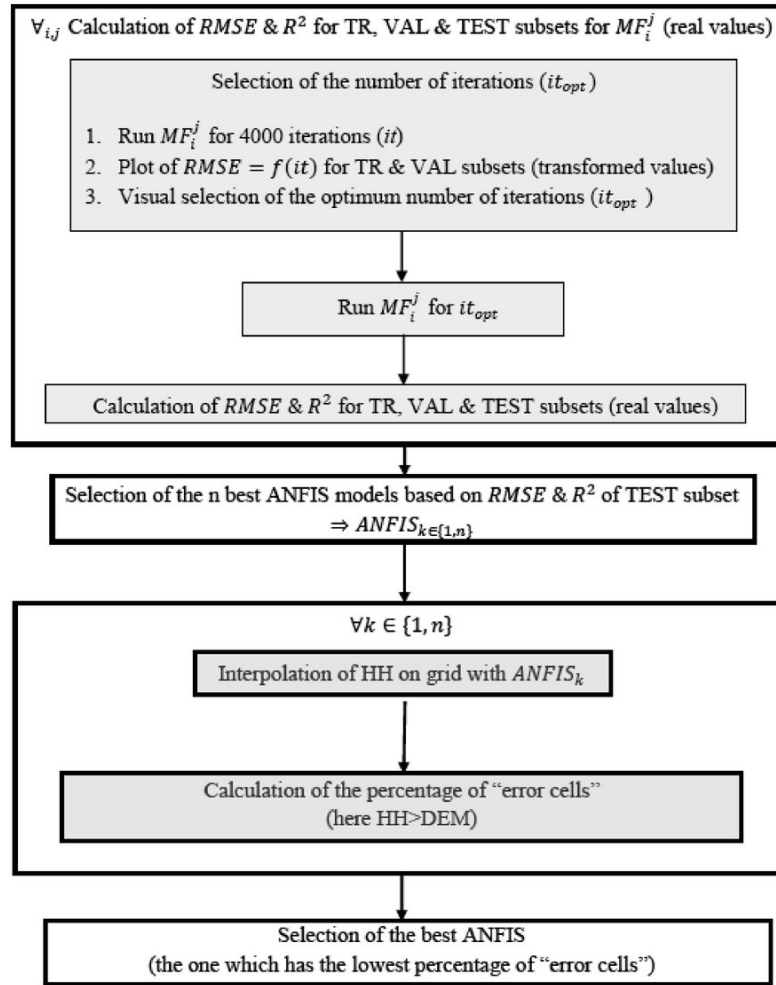


FIGURE 2.5: Méthode de sélection d'un interpolateur ANFIS. HH : Hauteur piézométrique. MF_i^j : Fonction d'appartenance de type i, avec j noeuds pour chaque variable d'entrée du réseau. D'après Kurtulus and Flipo (2012).

permet d'interpoler simplement un jeu de données piézométriques et pourrait fournir un outil intéressant aux gestionnaires qui ne maîtrisent pas la technicité de la géostatistique, comme par exemple l'ajustement d'un modèle de variogramme nécessaire à l'estimation (Cressie and Hawkins, 1980). De même la validation croisée est une étape délicate à maîtriser (Davis, 1987). Même si plus légère d'utilisation, GEO-ANFIS est très sensible aux données d'entrée (Kurtulus and Flipo, 2012) et ne permet pas d'accéder à des informations concernant la qualité de l'interpolation comme le permet le krigeage en fournissant pour chaque cellule l'écart type de l'erreur d'estimation (Cressie and Hawkins, 1980; Mouhri et al., 2012a). Par contre ce type d'interpolateur permet d'utiliser des données qualitatives en entrée et pourrait donc permettre d'intégrer des informations de structure pour l'interpolation.

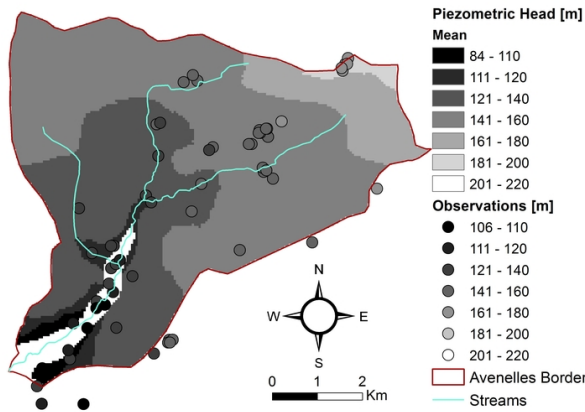


FIGURE 2.6: Carte piézométrique moyenne. D'après Flipo and Kurtulus (2011).

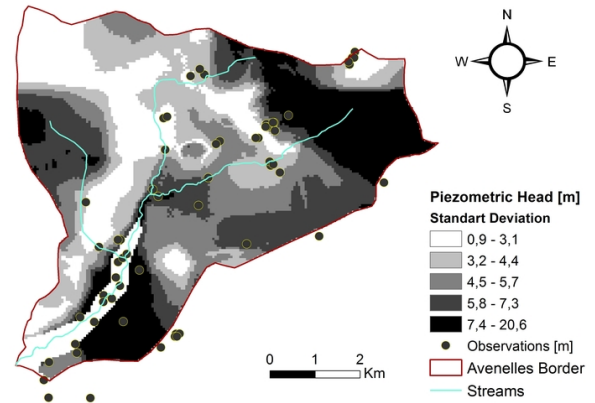


FIGURE 2.7: Distribution des écart-types associés à l'estimateur GEO-ANFIS. D'après Flipo and Kurtulus (2011).

2.2 Modélisation distribuée à base physique des hydrosystèmes continentaux

2.2.1 La notion de modèle

Au sens large, on définit un modèle comme un moyen permettant de raisonner sur un (ou des) phénomène(s) en faisant appel à des entités ou à des représentations de processus élémentaires qui sont censés être à l'origine de ce(s) phénomène(s), ou qui permettent de le(s) reconstituer par combinaisons ou assemblages (Kauark-Leite, 1990). Dans le contexte de la compréhension d'un hydrosystème, la modélisation a pour ambition de synthétiser le savoir déjà acquis dans les différentes spécialités scientifiques et de l'intégrer dans une représentation conceptuelle du système afin de faciliter l'analyse globale du milieu pour le gérer ensuite au mieux. Cette démarche pose de nombreux problèmes comme l'acquisition des données de base, l'interprétation des phénomènes à une certaine échelle spatio-temporelle, le changement d'échelle afin d'utiliser une connaissance sur un domaine différent de celui de validité *a priori*, la fiabilité du modèle.

Comme le fait remarquer Kauark-Leite (1990), "*c'est la question qui doit déterminer la construction du modèle et non l'inverse et c'est le type de questions qui restreint le mode de modélisation à choisir*". C'est ainsi que, par exemple dans le domaine de l'annonce des crues, on pourra faire le choix d'utiliser des modèles simples et robustes, comme les modèles GR (Edijatno et al., 1999; Perrin et al., 2001, 2003). Par contre, dès lors que l'on souhaite représenter des flux de polluants, contraints essentiellement par la physique du milieu, de tels modèles ne sont plus adaptés puisqu'ils n'ont pas pour objectif de représenter les mécanismes de transfert à l'intérieur du domaine modélisé. Pour simuler des hétérogénéités de champ, il convient alors d'utiliser des modèles distribués (Ivanov et al., 2004; Refsgaard, 1997; Smith et al., 2004).

Les modèles de simulation cherchent à reproduire des phénomènes ou à prévoir le comportement d'un système soumis à des sollicitations données. On calcule l'évolution de variables inconnues (les sorties) en fonction des variables connues (les entrées) et des paramètres du système. Nous nous intéresserons uniquement à ces modélisations parmi lesquelles trois grands

types de modèles émergent ([Kauark-Leite, 1990](#)) :

- Les modèles mécanistes qui englobent les modèles physiques et déterministes.
- Les modèles conceptuels qui englobent les modèles paramétriques, boîte-grise, et synthétiques.
- les modèles empiriques qui englobent les modèles boîte-noire et entrée-sortie.

Les modèles mécanistes décrivent les mécanismes internes du système en se basant sur une bonne connaissance de la structure physique du système et sur des lois de la mécanique, de la physique (conservation de la masse, de l'énergie, de la quantité de mouvement, etc.), de la chimie (équilibre chimique et thermodynamique, cinétiques chimiques) ou de la biologie (lois de comportement de croissance). Quand la structure du système et les lois qui le régissent sont inconnues, ou quand la mise en œuvre d'un modèle mécaniste devient trop compliquée (informations insuffisantes), on procède à une simplification de la représentation du système en terme de géométrie et de processus. On aboutit alors à des modèles conceptuels qui ont pour objectif de décrire le concept physique de comportement du système par une représentation plus simple. Cette représentation, bien qu'ayant un sens physique, s'éloigne de la réalité physique. Ces modèles peuvent être distribués au sens spatial ou non. Pour leur part, les modèles empiriques ne font pas référence aux processus internes du système et se contentent simplement d'établir des relations directes entre les variables de forçage (entrées) et les variables de sortie.

Au sein de cette classification, certains modèles peuvent aussi être désignés comme étant stochastiques, s'ils prennent en compte le caractère aléatoire de certaines variables du modèle sous la forme d'une fonction de distribution de probabilités. Notons par ailleurs que, dans le cas de couplages entre modèles, il est possible de combiner des modèles conceptuels et mécanistes. C'est le cas par exemple du modèle hydrologique couplé MODCOU ([Ledoux, 1980](#); [Ledoux et al., 1984](#); [Golaz-Cavazzi, 1999](#)) qui représente les bilans hydriques à l'aide d'un modèle à réservoirs, et les écoulements souterrains avec un modèle mécaniste.

2.2.2 Etat de l'art des modèles mécanistes distribués

Depuis le début des années 70, de très nombreux modèles ont été utilisés pour étudier différents types d'hydrosystèmes. Ces modèles peuvent être soit empirique/conceptuel et/ou stochastique/basé sur une représentation à base physique des processus. [Loague and VanderKwaak \(2004\)](#) estiment que le nombre de modèles développés dépasse facilement le millier. Des revues bibliographiques des modèles de bassin peuvent être trouvées dans [Ambroise \(1999\)](#); [Arheimer and Olsson \(2003\)](#); [Beven \(1989\)](#); [Flipo \(2005\)](#); [Singh and Woolhiser \(2002\)](#); [Ville-neuve et al. \(1998\)](#).

Les premiers modèles mécanistes distribués (MMD) de bassins sédimentaires ont été développés au cours de années 70 et 80 en utilisant un schéma numérique aux différences finies ([Abbott et al., 1986a](#); [Freeze, 1971](#); [Harbaugh et al., 2000](#); [Ledoux et al., 1989](#); [de Marsily et al., 1978](#); [McDonald and Harbaugh, 1988](#); [Parkin et al., 1996](#); [Refsgaard and Knudsen, 1996](#)). Pour ce type d'approche, l'hydrosystème est divisé en compartiments qui échangent au travers d'interfaces. Plus récemment (depuis la fin des années 90) de nouvelles approches, utilisant un schéma numérique aux éléments finis mixtes, ont été développées qui permettent de simuler en 3D la pression de l'eau et non plus seulement la charge en pseudo 3D ([Bixio et al., 2002](#); [Goderniaux et al., 2009](#); [Kolditz et al., 2008](#); [Kollet and Maxwell, 2006](#); [Li et al., 2008](#); [Panday and Huyakorn, 2004](#); [Therrien et al., 2010](#); [VanderKwaak and Loague, 2001](#); [Weill et al., 2009](#)). Cependant du fait du nombre d'éléments de calcul très importants, l'utili-

sation de tels modèles n'est pas encore adaptée à la simulation de grands bassins sédimentaires d'une superficie supérieure à 10 000 km², à de hautes résolutions spatiales, et pour de longues périodes temporelles (quelques décades) (Gunduz and Aral, 2005), sans avoir recours à des techniques de calcul parallèle. La démonstration de la faisabilité de tels calculs pour un bassin de 1000 km² à haute résolution spatiale n'a été apportée que très récemment par Kollet et al. (2010). Les gammes spatio-temporelles d'application des MMD les plus utilisés sont renseignées dans le tableau 2.2.

Modèle	Surf	Subsurf	eNR•	Δx	Δt
Blueprint					
	Freeze and Harlan (1969); Freeze (1971, 1972a,b)				
MODCOU	isochronisme	diffusivité pseudo3D DF	conductance	100 km ² - 100 000 km ²	jours - siècle
	Etchevers et al. (2001); Girard et al. (1981); Golaz-Cavazzi et al. (2001) Gomez et al. (2003); Habets et al. (1999a,b,c, 2010); Korkmaz et al. (2009) Ledoux (1980); Ledoux et al. (1984, 1989); de Marsily et al. (1978) Thierion et al. (2012); Violette et al. (1997)				
MODFLOW	dépend du couplage	Boussinesq 3D DF	conductance	0.02 ha - 30 000 km ²	heures - siècle
	Bauer et al. (2006); Boronina et al. (2003); Bradley (2002); Cardenas et al. (2004) Conan et al. (2003); Gedeon et al. (2007); Haitjema et al. (2001); Hanson et al. (2010) Harbaugh et al. (2000); Hunt et al. (2003); Jeppesen et al. (2011) Jobson and Harbaugh (1989); Jyrkama et al. (2002); Krause et al. (2008, 2009a) Molénat and Gascuel-Odoux (2002); McDonald and Harbaugh (1988, 2003) Prommer et al. (2003); Scanlon et al. (2003); Sophocleous et al. (1999) Sophocleous and Perkins (2000); Woldeamlak et al. (2007)				
SHE	Saint-Venant 1D DF	Boussinesq 3D DF	conductance	5 ha - 16 000 km ²	jours - ans
	Abbott et al. (1986a,b); Christiaens et al. (1995); Jain et al. (1992); Refsgaard et al. (1992) Storm et al. (1987); Wicks and Bathurst (1996)				
MIKE SHE	Saint-Venant 1D DF	Boussinesq 3D DF	conductance	10 km ² - 10 000 km ² †	heures - décades
	Andersen et al. (2001); Fu et al. (2011); Hansen et al. (2007); Henriksen et al. (2003, 2008) Refsgaard and Knudsen (1996); Refsgaard (1997); Refsgaard et al. (1998, 1999) Singh et al. (1999); Sonnenborg et al. (2003); Thompson et al. (2004) Thorsen et al. (2001); Trolborg et al. (2007); Vázquez et al. (2002)				
SHETRAN	onde diffusive 1D DF	Boussinesq 3D DF	conductance	3 ha - 2 000 km ²	heures - millénaire
	Adams et al. (2005); Anderton et al. (2002a); Bathurst et al. (2003, 2004, 2006, 2011) Birkinshaw and Bathurst (2006); Birkinshaw (2008); Birkinshaw and Webb (2010) Bovolo et al. (2009); Burton and Bathurst (1998); Elliott et al. (2012) Ewen et al. (2000); Koo and O'Connell (2006); Lukey et al. (2000); Lunn et al. (1996) Moxey and White (1998); Norouzi Banis et al. (2004); Parkin et al. (1996, 2007) Sloan and Ewen (1999); Walsh and Kilsby (2007)				
InHM	onde diffusive ^m 2D EF	Richards 3D EF	conductance	15 m ² - 100 km ²	heures - siècle
	BeVille et al. (2010); Ebel and Loague (2006, 2008); Ebel et al. (2008)				

Modèle	Surf	Subsurf	eNR•	Δx	Δt
Heppner et al. (2006, 2007); Heppner and Loague (2008); Loague and VanderKwaak (2002) Loague et al. (2005, 2006); Mirus et al. (2007, 2011b,a); Ran et al. (2007, 2012) VanderKwaak and Loague (2001)					
HGS ^{1,◊}	onde diffusive ^{dw} 2D EF	Richards 3D EF	conductance	1 m ² - 175 000 km ² ‡	heures - 300 000 ans
Alexander et al. (2011); Brookfield et al. (2009); Frei et al. (2010); Goderniaux et al. (2009) Graf and Therrien (2008); Haslauer et al. (2012); Ji et al. (2008); Jones et al. (2006, 2008) Lemieux and Sudicky (2010); Li et al. (2008); Park et al. (2008, 2009) Partington et al. (2011); Shin et al. (2010); Therrien and Sudicky (2001) Therrien et al. (2010)					
MODHMS	Onde diffusive ^{dw} 2D DF	Richards 3D VF	conductance	0.8 km ² - 3 200 km ²	heures - décades
Barron et al. (2013); Donn et al. (2012); Gallagher and Doherty (2007) Gaukroger and Werner (2011); Panday and Huyakorn (2004); Panday et al. (2009) Schoups et al. (2005); Vrugt et al. (2004); Werner et al. (2006)					
CAWAQS	Saint-Venant ^m 1D DF	diffusivité pseudo3D DF	conductance	2 500 km ²	décades
Flipo (2005); Flipo et al. (2005, 2007b,c)					
PARFLOW [◊]	onde cinématique ^m 2D EF	Richards 3D EF	continuité	3 ha - 13 000 km ²	heures - décades
Abu-El-Sha's and Rihani (2007); Atchley and Maxwell (2011); Fergusson and Maxwell (2010) Frei et al. (2009); Jones and Woodward (2001); Kollet and Maxwell (2006, 2008) Kollet (2009); Kollet et al. (2010); Maxwell and Miller (2005); Maxwell and Kollet (2008) Meyerhoff and Maxwell (2011); Rihani et al. (2010); Tompson et al. (1999)					
EauDyssée*	Muskingum CT* + 1D DF	diffusivité pseudo3D DF	conductance	1 000 km ² - 100 000 km ²	heures - siècle
David et al. (2011); Flipo et al. (2012); Monteil et al. (2010); Philippe et al. (2011) Saleh et al. (2011)					
OGS ^{2,◊}	Saint-Venant 1D DF	Boussinesq 3D EF	conductance	3 ha - 20 000 km ²	heures - siècle
Delfs et al. (2012); Kolditz et al. (2008, 2012b); Sun et al. (2011); Wang and Kolditz (2007) Wang et al. (2009a); Wu et al. (2011)					
CATHY	Muskingum-Cunge 1D DF	Richards 3D EF	continuité	0.01 ha - 690 km ²	heures - décades
Bixio et al. (2002); Camporese et al. (2009, 2010); Gauthier et al. (2009) Sulis et al. (2011); Weill et al. (2011)					
DF : Différences Finies ; EF : Éléments finis mixtes ¹ HGS : HydroGeoSphere ; ² OGS : OpenGeoSys • Échanges nappe-rivière, * Courbes de Tarage , ◊ code parallélisé, * parallélisable par tâche † Seuls Andersen et al. (2001) ont traité d'une extension plus large de 375 000 km ² ‡ Seuls Lemieux and Sudicky (2010) ont traité d'une extension continentale de 25 Mkm ² ^m les frottements sont calculés avec la formule de Manning ^{dw} les frottements sont calculés avec la formule de Darcy-Weisbach					

TABLE 2.2: MMD couplés surface-souterrain

Dans le domaine de la modélisation semi-distribuée à base physique, une approche originale, se basant sur le concept de bassin élémentaire représentatif (REW pour Representative Elementary Watershed) a été développée (Reggiani et al., 1998, 1999; Varado, 2004). Par construction, cette approche a pour objectif de simuler des hydrosystèmes continentaux dont les limites sont celles d'un bassin versant de surface. A l'intérieur de ce domaine, les cellules de base sont les REW, qui correspondent aux sous-bassins versants élémentaires correspondant à un ordre de Strahler donné. Chaque REW est ensuite découpé en cinq sous zones : la zone non saturée⁸, la zone saturée dont le toit est localisé sous la surface, la zone saturée sur laquelle se produit un ruissellement par saturation de fond (Dunne, 1978), la zone non saturée sur laquelle se produit un défaut d'infiltration (Horton, 1933), et le réseau hydrographique. Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement sont intégrées à l'échelle de chaque REW. Ultérieurement, le nombre de zones a été augmenté afin d'implémenter une approche énergétique (Tian et al., 2006). Ainsi chaque variable hydrologique d'intérêt est une moyenne par zone du REW, dont la valeur est affectée en plan (X,Y) au barycentre du REW. Il s'agit donc de valeurs moyennes censées représenter le fonctionnement du REW à l'échelle régionale. Les échanges entre REW sont calculés soit en utilisant le second principe de la thermodynamique (Reggiani et al., 1998, 1999), soit en utilisant la conservation de l'énergie dans un réseau en utilisant la loi de Kirchhoff (Reggiani and Rientjes, 2010). Cependant les échanges entre le réseau hydrographique et les aquifères sont simulés, comme pour la majorité des MMD, à l'aide d'un modèle de conductance (Zhang and Savenije, 2005) (cf. section 3.2.4, p.51 pour plus d'informations). Il est aussi à noter que le modèle, comme la seconde génération de MMD, n'a pas encore démontré sa capacité à simuler de grandes extensions spatiales sur plusieurs décades.

2.2.3 La plate-forme EauDyssée - un modèle adapté aux hydrosystèmes régionaux

La plate-forme de modélisation des hydrosystèmes EauDyssée⁹, développée au Centre de Géosciences de MINES ParisTech en collaboration avec l'UMR 7619 Sisyphe, permet de coupler des modules spécifiques pour modéliser le cycle de l'eau dans un bassin sédimentaire. Dans son état actuel, EauDyssée est une version du code MODCOU qui a été utilisé de multiples fois pour modéliser les écoulements de surface et souterrains dans des bassins d'échelles variées : les bassins de la Haute-Lys (350 km²) et du Caramy (204 km², Ledoux (1980)), une partie du bassin aquitain (14 500 km², Boukerna (1987)), le Piton de la Fournaise à La Réunion (980 km², Violette et al. (1997)), le bassin du Rhône (26 500 km², Etchevers et al. (2001); Golaz-Cavazzi (1999); Golaz-Cavazzi et al. (2001); Habets et al. (1999a)), le bassin de l'Adour ($\approx 6\,000$ km², Habets et al. (1999b,c)), le bassin de la Seine (65 000 km², Gomez (2002); Gomez et al. (2003); Ledoux et al. (2007)) ainsi que l'aval du bassin de l'Oise (4 000 km², Saleh (2010); Saleh et al. (2011)), le bassin de la Somme (8 205 km², Korkmaz et al. (2009)), la nappe alluviale du Rhin (4 655 km², Thierion et al. (2010, 2012)), et le bassin

8. Une des conséquence de ce découpage est que le modèle, contrairement aux deux autres grandes catégories de MMD, ne peut pas simuler de système aquifère multi-couches.

9. J'ai activement participé au développement de la plate-forme, en simulant explicitement les fluctuations des niveaux d'eau en rivière, ainsi qu'en m'intéressant aux procédures de calibration et de validation des modèles d'hydrosystèmes continentaux. Cette dernière action m'a amené à développer le programme WODIC (Wrapper for EauDyssée) qui permet, entre autres, de piloter de multiples simulations pour permettre de calculer des courbes d'apprentissage, ainsi que de calculer des statistiques sur les débits et flux échangés à l'interface nappe-rivière. Ces aspects sont développés dans les parties suivantes du mémoire.

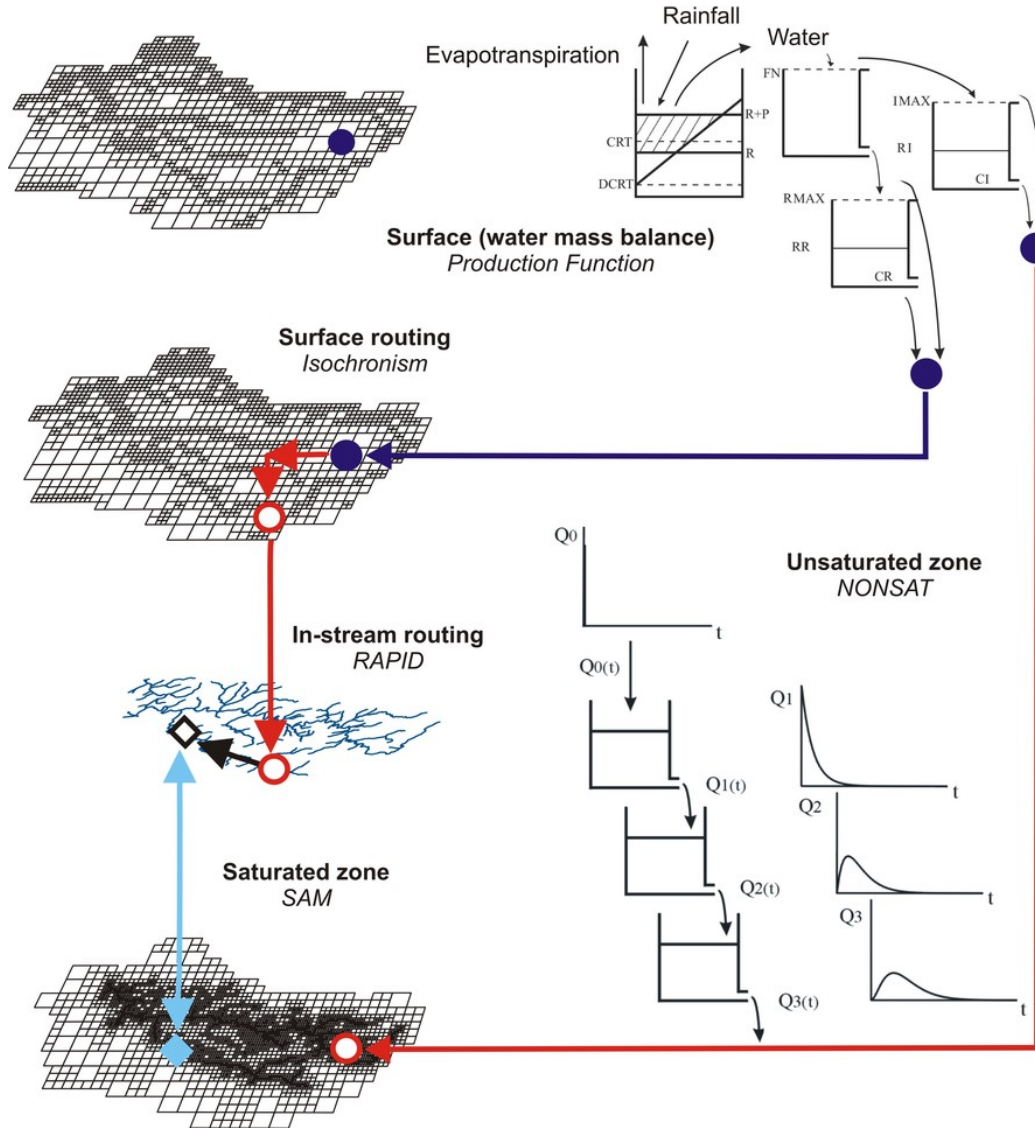


FIGURE 2.8: Structure de EauDyssée. D'après Flipo et al. (2012)

de la Loire (120 000 km², Monteil et al. (2010); Monteil (2011)). La plate-forme est aussi utilisée dans le cadre de l'application SIM de Météo France qui effectue les calculs à l'échelle nationale (Habets et al., 2005, 2008; Quintana-Seguí et al., 2009; Rousset et al., 2004; Thirel et al., 2010).

Dans EauDyssée, l'hydrosystème est conceptuellement divisé en trois compartiments principaux : la surface, la zone non-saturée et la zone saturée. Cinq processus sont associés à ces compartiments : le bilan hydrique de surface (à ce stade, il s'agit de répartir les précipitations en évaporation, infiltration et ruissellement), les écoulements sur les versants, les écoulements en rivière, les écoulements à travers la zone non saturée, et les écoulements souterrains. Chaque un de ces processus est modélisé par un module qui peut être activé séparément dans le code

(Fig. 2.8, p.23). La plate-forme est décrite en détail en Annexe A, p.96.

2.3 Ajustement des modèles

2.3.1 Assumer et contourner l'équifinalité

De nombreux auteurs, comme par exemple Hunt et al. (2007), vont dans le sens d'un usage plus courant des MMD même si les méthodologies de calibration restent à définir (Reed et al., 2004). Cependant l'un des problèmes majeurs rencontrés lors de l'utilisation de tels modèles est résumé par le concept d'équifinalité (Beven, 1989; Klemes, 1983). L'équifinalité au sens large correspond au fait que des processus différents peuvent mener aux mêmes effets (Ebel and Loague, 2006). Cela est lié à la faible quantité de données quantitatives qui ne permet pas de fermer mathématiquement le système d'équations utilisées pour décrire le fonctionnement du système. Par conséquent toutes les inconnues ne peuvent pas être calculées analytiquement. Par ailleurs, on peut distinguer plusieurs types d'erreurs dans les modèles (Beven, 2006a; Beven et al., 2011; Polus et al., 2011) :

- Erreurs sur les données de forçage ;
- Erreurs sur les données de structure du modèle ¹⁰ ;
- Erreurs sur la formalisation des processus dans le modèle ;
- Erreurs sur la valeur des paramètres du modèle ;
- Erreurs sur la structure interne du modèle ¹¹ (Butts et al., 2004) ;
- Erreurs sur les valeurs d'initialisation entrées dans le modèle ;
- Erreurs de mesure contenues dans les données utilisées pour l'ajustement du modèle ;
- Erreurs "épistémiques" (Beven and Westerberg, 2011), liées au fait que certaines chroniques de données peuvent engendrer de la désinformation en cas de dysfonctionnement non remarqué de capteurs par exemple, ou encore en cas d'absence d'enregistrements lors d'évènements extrêmes.

Comme l'indique Beven (2006b) : “there are different philosophies about how to estimate uncertainties and take into account input, measurement and model structural error. These will be difficult to resolve in the near future because we do not actually have the data to properly test the different methodologies¹²”. Le même auteur poursuit en affirmant : “it is simply not possible to evaluate the statistical characteristics of input data errors or parameter estimation errors¹³”. Finalement Efstratiadis et al. (2008) concluent avec : “it is impossible to detect a global optimal model structure or a “global” optimal parameter set, which definitely better reproduce the entire hydrological regime of a river basin¹⁴”.

Un autre point de vue plus constructif est avancé par de Marsily (1994) concernant les bassins jaugés : “most [...] models currently used in hydrology on series of observed data are actually quite similar. They may be called deterministic or even stochastic, conceptual or distributed but the basic principle of all these “fitted” models is the same : the “engine” in the

10. Définitions spatiales et temporelles du modèle

11. Conceptualisation du système et transfert de l'information entre les sous-modules du modèle

12. Il y a différentes philosophies sur la manière d'estimer les incertitudes et de prendre en compte les erreurs de forçage, de mesure et de structure d'un modèle. Il sera difficile de résoudre ce point dans un futur proche car nous ne disposons pas des données pour tester correctement différentes méthodologies.

13. Il est tout simplement impossible d'évaluer la structure statistique des erreurs concernant les forçages ou les estimations des valeurs des paramètres.

14. Il est impossible d'identifier une structure optimale de modèle ou un jeu de paramètres globalement optimum qui permette de reproduire effectivement le régime hydrologique d'un bassin versant dans son ensemble.

*box is created by the data set and its exact nature is irrelevant*¹⁵. Ainsi du point de vue de l'hydrologue, le problème n'est pas de comprendre la nature exacte du modèle utilisé, mais de comprendre les processus qui génèrent les observations. Et malheureusement, comme le soulignent Loague and VanderKwaak (2004), bien souvent les modélisateurs ne disposent pas de suffisamment de données observées pour pouvoir cerner complètement le fonctionnement du système étudié. Des pistes de réflexion récentes utilisent la géostatistique (Polus-Lefebvre, 2010; Polus et al., 2011) pour caractériser les incertitudes liées à la représentation des processus dans les modèles, mais aussi à l'estimation des forçages des modèles (voir sections 4.3.2, p.83). Cependant, le cadre théorique ainsi que les outils informatiques doivent encore être développés en hydrologie pour pouvoir mettre en œuvre ces puissants outils d'analyse pour de grandes extensions spatiales sur de longues périodes temporelles.

Malgré le problème majeur d'équifinalité, des méthodologies d'ajustement, et plus particulièrement de calibration ont été développées. Par exemple, il est maintenant reconnu qu'il est nécessaire de mettre en œuvre des calibrations multi-objectif afin de mieux appréhender les erreurs internes aux modèles ainsi que les incertitudes relatives aux résultats de calcul. De la même manière il convient d'utiliser plusieurs jeux de paramètres en accord avec les propriétés naturelles de l'hydrosystème pour effectuer plusieurs simulations explicatives de son comportement (Anderton et al., 2002a,b; Efstratiadis et al., 2008; Efstratiadis and Koutsoyiannis, 2010; Gill et al., 2006; Gupta et al., 1998; Khu et al., 2008; Madsen, 2003; Shrestha and Rode, 2008). Par rapport à une calibration mono-objectif, une calibration multi-objectif permet, certes, de mieux cerner les incertitudes liées aux modèles (Blasone et al., 2008), cependant il est aussi important de favoriser le dialogue entre scientifiques et gestionnaires pour ce qui concerne la définition pratique des critères (ou fonctions objectifs) de calibration (Refsgaard and Henriksen, 2004).

Une autre question importante pour l'utilisation des modèles est celle de leur capacité prédictive. Cette question ne peut être traitée que dans des cas d'études concrets. Généralement cette question est traitée dans le processus d'ajustement par l'étape de validation (Refsgaard and Henriksen, 2004). Elle consiste à soumettre le modèle calibré à d'autres contraintes que celles utilisées pour la calibration, par exemple une période temporelle différente. Historiquement, le jeu de données était divisé en deux périodes, servant respectivement à la calibration et à la validation du modèle (Refsgaard, 1997) afin d'éviter une sur-paramétrisation du modèle (ou *over-fitting*). Au début des calculs à base de réseaux neuronaux (Jang, 1996), cette technique a aussi été employée. Cependant rapidement la nécessité d'utiliser un troisième jeu de données appelé "test" est apparue afin d'éviter les problèmes de sur-paramétrisation du modèle et pour s'assurer de la robustesse du modèle (voir par exemple Abrahart et al. (2004); Heuvelmans et al. (2006); Kurtulus and Razack (2007); Kurtulus et al. (2011); Kurtulus and Flipo (2012); Maier and Dandy (2000); Maier et al. (2010) pour une utilisation de ces modèles en hydrologie/hydrogéologie). Récemment, Flipo et al. (2012) ont aussi intégré un jeu de test dans leur méthodologie hybride d'ajustement d'un MMD décrivant le fonctionnement de l'hydrosystème de la Beauce (8 000 km²) sur 40 ans. Ce jeu de test leur a permis, entre autres, de montrer que le modèle ne dérivait pas à long terme.

Comme il a été vu auparavant, l'utilisation de MMD requiert un grand nombre de données pour pouvoir paramétrer le modèle qui peut très rapidement contenir plusieurs centaines

15. La plupart des modèles couramment utilisés en hydrologie sur la base de séries de données observées sont en fait très similaires. Ils peuvent être appelés déterministes, stochastiques, conceptuels ou distribués mais le principe de base de tous ces modèles "ajustés" est le même : le "moteur" de la boîte est généré par le jeu de données et son exacte nature n'est pas la question.

de milliers de paramètres. Une méthode automatique de calibration n'existe pas à ce jour, mais la question stratégique demeure : faut-il utiliser une méthode manuelle, automatique ou hybride ? L'argument principal, militant pour l'utilisation d'une méthode complètement automatisée, repose sur le fait que la principale source d'erreur dans ce processus de calibration/ajustement provient de la perception et de la subjectivité du modélisateur lui-même (Boesten, 2000; Heuvelmans et al., 2006). Cela a mené certains auteurs à formaliser et introduire le point de vue de l'utilisateur sous forme d'un savoir expert dans le processus de calibration (Boyle et al., 2000; Hundecha and Bárdossy, 2004; Shrestha and Rode, 2008). Cependant aucune de ces études ne traite d'un hydrosystème dans son entièreté, mais seulement d'une de ses parties, comme le domaine souterrain par exemple. De plus, ces méthodologies sont très consommatrices en temps de calcul (Zhang et al., 2009) et il n'est pas évident qu'elles apportent un gain qualitatif réel. En effet, l'automatisation repose sur des fonctions objectifs qu'il faut définir. D'une part une méthode automatique limite de fait le nombre de fonctions objectif (par exemple des critères statistiques ou les caractéristiques statistiques d'une distribution spatiale), et certains critères comme la comparaison visuelle de chroniques simulées avec des chroniques observées ne sont pas implémentables numériquement avec des méthodes traditionnelles. Par ailleurs, lors d'un processus d'optimisation les méthodes automatiques se retrouvent parfois bloquées au niveau des minima locaux (Carrera et al., 2005), sans moyen pour l'utilisateur d'en avoir conscience si ce n'est par la médiocrité des résultats obtenus lors de l'utilisation de cette paramétrisation. Pragmatiquement, il n'existe pas aujourd'hui de méthode complètement automatisée d'ajustement d'un MMD d'un hydrosystème, et la mise en place d'une telle méthode nécessiterait de lourds développements théoriques et informatiques. Cependant comme revendiqué par Carrera et al. (2005) en accord avec Poeter and Hill (1997) : *"the time is ripe for standard use of inverse modeling in groundwater studies aimed at aquifer characterization and management"*¹⁶. Un bon compromis semble donc de développer des méthodologies hybrides d'ajustement (Mazi et al., 2004; Rozos et al., 2004) en pilotant manuellement et par étapes des phases de calibration manuelles et automatiques de sous-parties de l'hydrosystème, comme les eaux souterraines par exemple (Luzio and Arnold, 2004). Une méthode hybride d'ajustement adoptant cette stratégie (Fig. 2.10) est présentée section 2.3.3, p.29.

2.3.2 Le problème inverse en hydrogéologie

La compréhension de systèmes hydrogéologiques complexes nécessite l'utilisation d'outils de simulation des transferts d'eau dans des milieux hétérogènes (Pasquier and Marcotte, 2006). Les modèles numériques requièrent les propriétés hydrauliques de l'aquifère, ainsi que des conditions initiales (CI) et aux limites (CL), et ce pour l'ensemble du domaine d'étude. Les mesures de paramètres étant peu nombreuses et/ou inaccessibles (Carrera et al., 2005; de Marsily et al., 1999), il est très difficile de définir des champs de paramètres pour un modèle (de Marsily et al., 1999). Ainsi le recours à des méthodes d'estimation de ces champs est indispensable et se base souvent sur la résolution d'un problème inverse, c'est à dire à partir des observations des variables d'état, en déduire les propriétés du milieu. Cela signifie que les inconnues de l'équation de diffusivité (eq. A.8, p.101) en deviennent les paramètres, et les paramètres les inconnues. Historiquement, depuis le début des années 70, la résolution

16. *L'heure est arrivée d'utiliser en routine des méthodes d'inversion pour étudier des problèmes de caractérisation et de gestion de la ressource en eaux souterraines*

TABLE 2.3: Méthodes d'inversion en hydrogéologie. D'après Flipo et al. (2012)

Méthode	Geo	ML	Cible	Régime	Données	Étude	Réf
Adjoint			T,S	tran	HHI	485 km ²	Vemuri and Karplus (1969)
M			T	per	HHd	10 km ²	Emsellem and de Marsily (1971)
M			T	per	HHd	hypo	Yeh and Tauxe (1971)
LA			T	per	HHd,	hypo	Frind and Pinder (1973)
					T limite		
M			T	tran	HHd, S	hypo	Sagar et al. (1975)
			T,S	per, tran	HHI	210 km ²	Nutbrown (1975)
M			T	tran	HHI, S	hypo	Distefano and Rath (1975)
M			T,S	tran	HHI	800 km ²	Navarro (1977)
PPM	×		T	per	HHI, Tl	310 km ²	de Marsily (1978)
ML + M	×	×	T	per	HHd	hypo	Neuman and Yakowitz (1979)
ML + M		×	T	per	HHd	400 km ²	Neuman et al. (1980)
LCM	×	×	T	none	HHI, Tl	hypo	Kitanidis and Vomvoris (1983)
M	×		T	per	HHd	hypo	Yeh and Yoon (1981), Sadeghipour and Yeh (1984)
LSM	×	×	T	none	HHd, Tl	hypo	Dagan (1985)
M			T	tran	HHI	hypo	Sun and Yeh (1985)
ML + M		×	T	per, tran	HHI, Tl	100 km ²	Carrera and Neuman (1986)
M			K	per	HHI, Tl	200 000 km ²	Cooley et al. (1986)
Simplex			T	per	HHI, Tl	16 km ²	Woodbury and Smith (1987)
LSM	×	×	T	none	HHI, Tl	real	Rubin and Dagan (1987)
Adjoint	×		T	tran	HHI, Kl	hypo	Sun and Yeh (1992)
Geostat	×		T	per	HHI, Tl	hypo	Ahmed and de Marsily (1993)
PPM	×		T	per	HHd, Tl	720 km ²	RamaRao et al. (1995), LaVenue et al. (1995), Cooley and Hill (2000), RamaRao et al. (2000)
SSC	×		T	per	HHd, Tl	hypo	Gomez-Hernandez et al. (1997), Capilla et al. (1997)
Geostat	×		T	per	HHd, Tl	4 km ²	Roth et al. (1998)
SSC	×		T	per, tran	Q, Pl	hypo	Wen et al. (1999, 2002)
Geostat	×		T	per, tran	Tl, Q	100 m ²	Meier et al. (2001)
PPM	×		T	per	HHd, Tl	6 km ²	Doherty (2003)
Geostat	×		T	per	HHd, Kl	hypo	Hernandez et al. (2003)
Adjoint			T	per, tran	HHd, Q	hypo	Medina and Carrera (2003)
PPM	×	×	T	tran	HHI, Q	hypo	Alcolea et al. (2006)
PPM	×		T	per	HHd	160 km ²	Renard and Jeannée (2008)
Adjoint			T,S	tran	HHd	hypo	Liu et al. (2009)
AMT			T,S	tran	HHI	6.25 ha	Ackerer and Delay (2010)
AMT			T,S	tran	HHI	4 400 km ²	Majdalani and Ackerer (2011)
CMM			T	per	HHd	hypo	Ponzini and Lozej (1982)
DSM			T	per	HHd, Tl	hypo	Giudici et al. (1995), Gonzalez et al. (1997), Giudici et al. (1998), Giudici and Vassena (2006)
SFE			T,S	per, tran	HHd	hypo	Pasquier and Marcotte (2006)
CMM			T	per	HHd	2 500 km ²	Vassena et al. (2008)
SFE			T	per	HHd	8 000 km ²	Flipo et al. (2012)
GA			K	none	HHd, Kl	hypo	Heidari and Ranjithan (1998)
SC			T	none	TDS	19 000 km ²	Mukhopadhyay (1999)
SC			T	none	HHd or HHI	hypo	Garcia and Shigidib (2006)
SC	×		T	none	Tl	3 850 km ²	Kholghi and Hosseini (2006)
SC			T	none	Q	hypo	Lin and Chen (2006), Samani et al. (2007)
GA			T	none	HHd	hypo	Ayvaz et al. (2007)
SC			T,S	tran	HHI	hypo	Karahan and Ayvaz (2008)

Méthodes : M : Minimization; LA : Linear Algebra; ML : Maximum Likelihood; LCM : Linearized Cokriging Method; LSA : Least Square Approach; LSM : Linearized Semi analytical Method; Geostat : Geostatistics; PPM : Pilot Point Method; SSC : Sequential Self Calibration; CMM : Comparison Model Method; SFE : estimation successive des flux; DSM : Differential System Method; AMT : Adaptative Multiscale Triangulation; SC : Soft Computing; GA : Genetic Algorithm

Geo : Méthode utilisant la géostatistique; **ML** : Méthode utilisant le Maximum likelihood; **Cible** : T : Transmissivité; K : perméabilité; S : Emmagasinement; **Régime** : per : permanent; tran : transitoire; **Données** : HH : Charge piézométrique; HHd : Carte piézométrique; HHI : Chroniques piézométriques; Tl : Transmissivité locale; Kl : Perméabilité locale; Pl : pression locale; Q : Essai de pompage; S : Emmagasinement; TDS : Charge solide dissoute **Cas d'étude** : hypo : synthétique.

du problème inverse va de paire avec la résolution du problème direct (Tab. 2.3) (de Marsily et al., 1999), et elle se prête bien à l'automatisation (Poeter and Hill, 1997).

De nombreuses méthodes de résolution du problème inverse ont été développées et testées au cours des 40 dernières années (Carrera et al., 2005; Cooley, 1985; de Marsily et al., 1999; Hefez et al., 1975; Hoeksema and Kitanidis, 1985; Hendricks Franssen et al., 2009; McLaughlin and Townley, 1996; Yeh, 1986). Le Tableau 2.3 permet d'avoir une vue d'ensemble de ces méthodes en précisant pour 56 publications le champ objectif (transmissivités ou perméabilités et/ou coefficient d'emmagasinement), les données nécessaires pour mettre en œuvre la méthode et le système étudié (cas réel ou synthétique). Grossièrement trois grands types de méthodes émergent. La plus répandue (40 publications) utilise une optimisation globale basée sur une ou plusieurs fonctions objectif. La seconde (8 publications) minimise les erreurs localement tandis que la dernière (8 publications) utilise des concepts plus récents de soft computing comme outil de minimisation globale. 57 % des publications ont fait appel à des cartes piézométriques de référence, d'où l'importance des techniques d'interpolations des champs piézométriques (section 2.1.2, p.11) dans la résolution du problème inverse.

L'évaluation de ces méthodes basées sur des concepts mathématiques ardu est délicate et les quelques intercomparaisons qui ont été menées ne permettent pas réellement de les discriminer (Hendricks Franssen et al., 2009; Zimmerman et al., 1998). Le fait qu'aucune méthode ne soit significativement meilleure que les autres est en accord avec les conclusions de Carrera et al. (2005) qui écrit "*all the methods discussed previously ... are identical from the estimation viewpoint*"¹⁷. La plupart des méthodes, recensées dans le Tableau 2.3, est basée sur une minimisation globale qui utilise différents types d'algorithmes d'optimisation, linéaire ou non linéaire, soit séquentielle, soit stochastique. Un des problèmes majeurs est celui de l'unicité de la solution qui n'est jamais assurée par ces méthodes dès lors que l'on s'intéresse à un cas d'étude réel. Même les développements récents basés sur du soft computing ont échoué pour résoudre ce point majeur. Le choix d'une méthode s'avère donc épineux, et, d'un point de vue pragmatique, peut se baser sur le fait que la méthode a déjà été testée sur un cas réel, et si oui à quelle résolution spatio-temporelle. De manière surprenante, il apparaît alors que très peu de méthodes ont été testées sur des bassins versants dont l'extension spatiale dépasse 1 000 km² (seulement 18 % des papiers recensés Tab. 2.3), ce qui montre l'étendue du chemin qui reste à parcourir avant de pouvoir utiliser ces méthodes en routine.

Contrairement à la plupart des méthodes inverses, la méthode d'inversion par estimation successive des flux (ou SFE, cf. Tab 2.3), qui se base sur la méthode de comparaison de modèle (CMM, Ponzini and Lozej (1982)), réalise une minimisation locale des erreurs sur le gradient de charge. La méthode par estimation successive des flux présente l'avantage d'être efficace (Pasquier and Marcotte, 2006) car elle a un coût de calcul relativement faible, notamment lié au fait qu'aucun calcul d'inversion matricielle n'est nécessaire. De plus, la méthode a aussi fait ses preuves pour deux nappes libres de grande extension spatiale : 2 500 km² (Vassena et al., 2008), 8 000 km² (Flipo et al., 2012).

Une autre alternative à la méthode d'inversion SFE est la méthode d'optimisation par triangulation (Ackerer and Delay, 2010) qui a aussi été appliquée avec succès à une nappe libre de grande extension spatiale (4 400 km², Majdalani and Ackerer (2011)). Cette méthode est plus puissante que la méthode par estimation successive des flux car elle permet d'inverser des données transitoires, et donc d'obtenir des champs de transmissivités ainsi que des champs de coefficients d'emmagasinement. En contrepartie elle a un coût de calcul supé-

17. Toutes les méthodes analysées précédemment ... sont identiques du point de vue de l'estimation

rieur à la méthode par estimation successive des flux. Un autre point délicat de la méthode est qu'elle utilise une fonction objectif qui mélange des grandeurs non homogènes que sont les débits en rivière ainsi que les hauteurs piézométriques en aquifère. L'effet des poids accordés à ces grandeurs sur les résultats de l'inversion reste à examiner en détail. L'utilisation d'une méthode hybride en deux étapes permettant d'inverser le champ de transmissivités horizontales et verticales d'un système aquifère multicouche en régime permanent pour ensuite ajuster les coefficients d'emmagasinement en régime transitoire est recommandé par [Henriksen et al. \(2003\)](#); [Sonnenborg et al. \(2003\)](#), à condition que les estimations de la recharge soient indépendantes du processus d'optimisation. De plus, le fait d'optimiser tout d'abord les transmissivités en régime permanent permet de réduire le temps de calcul d'un à deux ordres de grandeur ([Henriksen et al., 2003](#)).

Par contre, à ce jour, il n'existe pas d'exemple dans la littérature d'application d'une méthode d'inversion pour l'ensemble d'un hydrosystème car les méthodes ont été développées séparément, soit pour les eaux de surface, soit pour les écoulements souterrains. Des développements méthodologiques sont donc encore à réaliser afin d'automatiser l'ajustement des paramètres de modèles d'hydrosystème s'intéressant à de grands bassins sédimentaires continentaux ([Henriksen et al., 2003](#)), comme le bassin de Paris.

2.3.3 Développement d'une méthodologie hybride d'ajustement

Comme l'a mentionné [de Marsily \(1994\)](#), la paramétrisation d'un MMD est "*créée par le jeu de données lui-même*". La complexité des modèles à mettre en œuvre est donc à définir au cas par cas en fonction de la densité spatio-temporelle des données piézométriques et de débits. Par contre, il n'en va pas de même des méthodologies d'ajustement dont la philosophie peut transcender la typologie des modèles utilisés.

2.3.3.1 Éviter la sur-paramétrisation : Calibration, test et validation

La méthode d'ajustement¹⁸ comprend plusieurs phases. Habituellement l'ajustement d'un MMD s'effectue en deux étapes correspondant à deux périodes temporelles distinctes¹⁹ ([Refsgaard and Knudsen, 1996](#)), qui permettent, dans un premier temps, de déterminer les paramètres du modèle (phase de calibration), et, dans un second temps, de tester le modèle calé soumis à un autre champ de contraintes (étape de validation). Cependant les exercices de modélisation, utilisant des concepts de logique floue et issus des méthodes basées sur les réseaux de neurones²⁰, ont montré que ce découpage en deux phases n'était pas suffisant pour se prémunir des problèmes de sur-paramétrisation des modèles. Un troisième jeu de données, appelé "test", est alors utilisé afin de s'assurer que le modèle n'est pas sur-paramétré ([Celi-kyilmaz and Turksen, 2009b](#); [Heuvelmans et al., 2006](#); [Kurtulus et al., 2011](#); [Kurtulus and Flipo, 2012](#); [Maier and Dandy, 2000](#)). Dans le cas où la densité du jeu de données le permet, l'ajout d'un jeu de test est donc recommandé pour mener à bien l'ajustement des MMD.

Dans le cadre de l'utilisation de trois jeux de données, la calibration et le test sont menés conjointement, c'est à dire que les résultats des fonctions objectif sont calculés simultanément pour les jeux de calibration et de test. Les choix d'ajustement s'effectuent sur la base des

18. L'ajustement comprend l'ensemble des processus de calibration, de test, et de validation. C'est l'ajustement qui garantit ensuite la capacité prédictive du modèle.

19. data splitting

20. Ces méthodes sont appelées soft computing

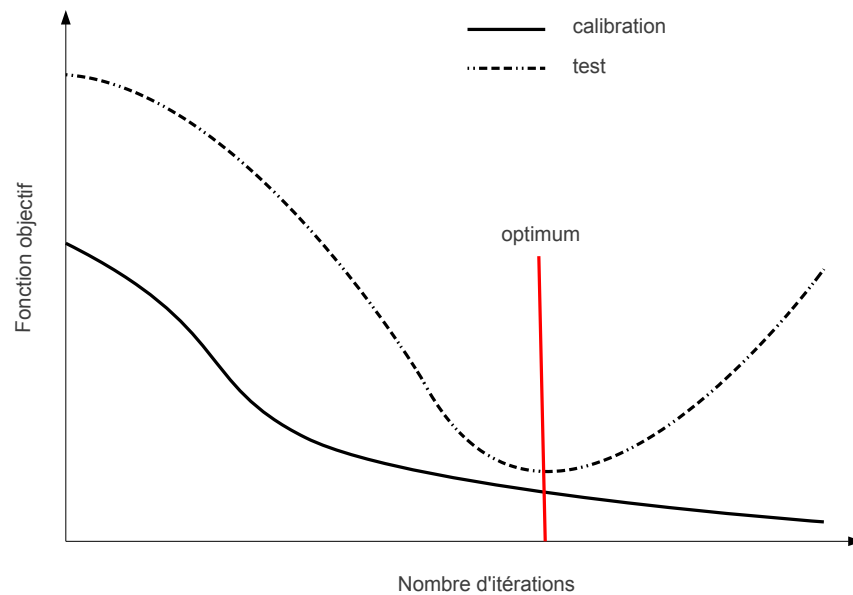


FIGURE 2.9: Exemple de courbes d'apprentissage : Calibration et Test simultanés

résultats de la simulation de calibration. Le jeu de calibration sert donc à déterminer les valeurs des paramètres. Cependant, dès lors que la modification de paramètres n'engendre plus de gain conjoint pour les deux jeux de données, le modèle commence à être sur-paramétré et le processus d'ajustement est arrêté. À ce stade la simulation de validation est lancée pour vérifier que le modèle est capable de simuler correctement le fonctionnement de l'hydrosystème soumis à des contraintes différentes. Les séquences de résultats de calibration et de test sont appelées courbes d'apprentissage (Fig. 2.9) par les modélisateurs utilisant des méthodes de soft computing.

2.3.3.2 Calibration en boucles imbriquées

La calibration des paramètres hydrodynamiques de l'hydrosystème comprend deux boucles itératives imbriquées (Fig. 2.10) correspondant à la calibration du domaine de surface d'une part (boucle i), et du domaine souterrain d'autre part (boucle j), cette dernière étant imbriquée dans la première boucle de surface. Pour la suite de cette partie, le lecteur est invité à se référer à l'Annexe A, p.96, pour plus de détails sur la signification des paramètres de EauDyssée.

Calibration des processus de surface La première étape de la calibration du domaine de surface consiste à ajuster manuellement les paramètres du bilan hydrique. Pour cela les paramètres CRT et DCRT des fonctions production sont calés (Fig. 2.8). Le critère choisi pour cette étape est que, pour une période de temps donnée, les débits moyens simulés, aux stations ne recouvrant pas le système aquifère et à l'exutoire du bassin versant de surface, soient égaux aux débits moyens observés. Dans cette phase, l'hypothèse est faite que la pluie efficace (variable "water" de la Fig. 2.8) est instantanément transférée au réseau hydrographique dans

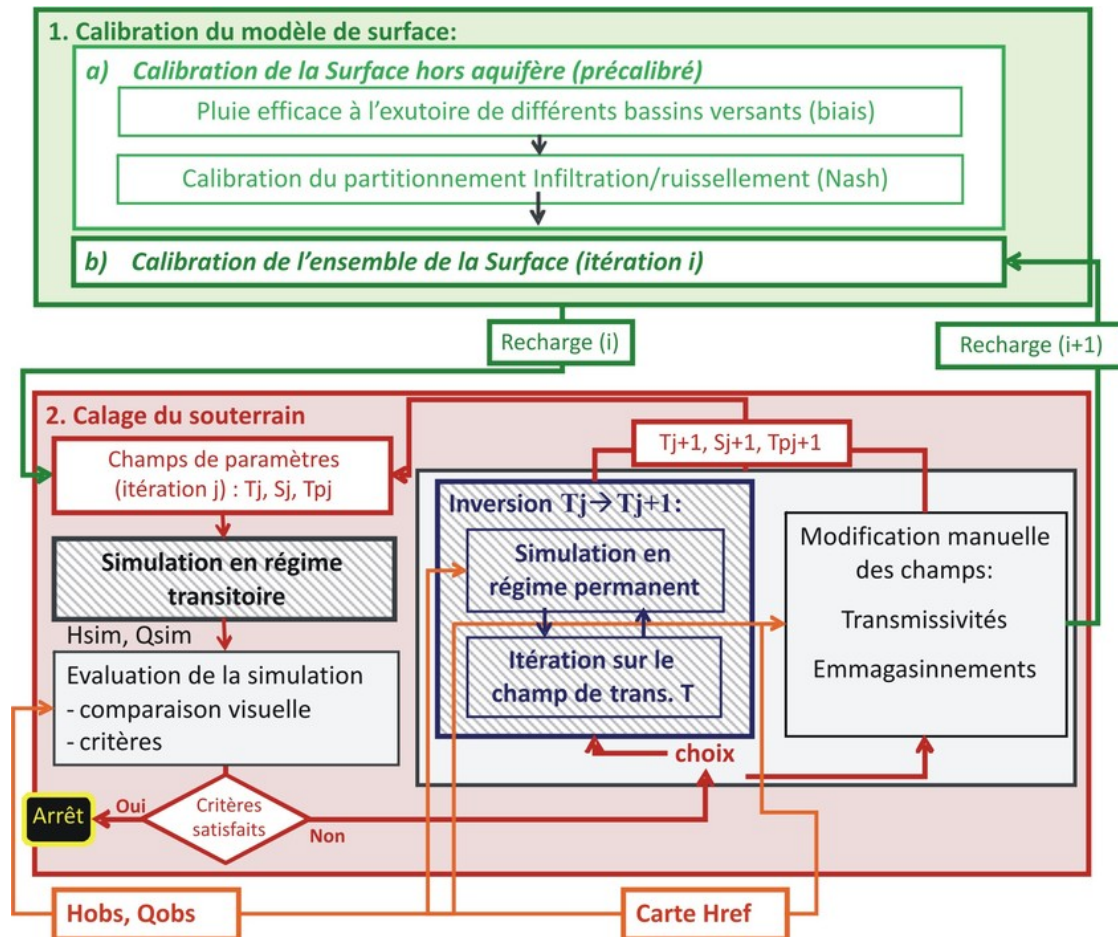


FIGURE 2.10: Méthode hybride de calibration en boucles imbriquées. Les étapes automatisées sont figurées en tirets grisés. Href : Carte piézométrique de référence ; Hobs et Qobs : Chroniques temporelles des charges piézométriques en aquifère et des débits en rivière ; T : Transmissivité ; S : Emmagasinement ; Tp : Coefficient d'échange nappe-rivière. D'après Flipo et al. (2012).

lequel elle est routée. Dans un second temps, le temps de concentration global du bassin est calibré en s'appuyant visuellement sur un bon phasage des pics de crue. Flipo et al. (2012); Monteil et al. (2010); Saleh (2010) ont montré que le paramètre k ²¹ pouvait être dérivé directement de l'analyse du MNT. L'ensemble de ces paramètres est alors calé définitivement pour la suite de l'ajustement du modèle. C'est alors que l'ajustement en boucles imbriquées du reste des paramètres commence. Une boucle i sur le reste des paramètres de surface est réalisée lorsque les boucles itératives j sur les paramètres souterrains ne permettent plus d'améliorer les performances du modèle. L'hypothèse que l'infiltration vers le système aquifère est mal simulée par la composante surfacique de EauDyssée justifie ce choix méthodologique d'imbrication des boucles de calage.

Une boucle i consiste à calibrer les paramètres de répartition de la pluie efficace entre ruissellement et infiltration (FN, Fig. 2.8), les coefficients de drainage des coefficients des réservoirs de ruissellement et d'infiltration (IMAX, CI, RMAX et CR, Fig. 2.8), ainsi que les paramètres de transfert dans la zone non saturée. La recharge spatialisée calculée à la fin d'une itération i devient alors une condition limite pour la calibration itérative du modèle souterrain (Fig. 2.10, boucle j).

Calibration des processus souterrains La calibration des paramètres hydrodynamiques du système aquifère est alors menée itérativement. Pour chaque itération j , une simulation en régime transitoire est menée pour la période de calibration et de test (section 2.3.3.1, p. 29, et Fig. 2.9). Des comparaisons visuelles des valeurs simulées *versus* valeurs observées ainsi que des critères statistiques (biais relatif, erreur quadratique moyenne, critère de Nash (Nash and Sutcliffe, 1970), critère de Nash calculé avec la transformée logarithmique des débits, coefficient de corrélation au pas de temps journalier, rapports d'écart-types des valeurs simulées sur celui des valeurs observées) sont utilisés pour estimer la qualité de la simulation (Flipo, 2005; Flipo et al., 2005, 2012; Monteil, 2011; Saleh, 2010; Saleh et al., 2011). Ce sont ces critères et courbes à optimiser qui constituent les fonctions objectif de la méthode. Il s'agit donc d'une méthode multi-objectif comme le requiert la calibration d'un MMD appliqué à des aquifères régionaux (Henriksen et al., 2003). Néanmoins deux critères globaux sont privilégiés comme critères d'arrêt :

- Le nombre de piézomètres pour lesquels le coefficient de corrélation est supérieur à 0.9 ;
- Le nombre de stations où le ratio des écarts-type simulés sur les écarts-type observés est compris entre 0.8 et 1.2.

A chaque itération j (*i.e* avant de lancer une nouvelle simulation transitoire qui constitue une nouvelle itération de la méthodologie d'ajustement du domaine souterrain), deux méthodes de calibration sont disponibles. La première méthode repose sur un ajustement manuel par essais-erreurs des paramètres. La seconde méthode repose sur la méthode inverse par estimation successive des flux (Pasquier and Marcotte, 2006) (Fig. 2.11).

Le principe de l'ajustement manuel par essais-erreurs est de modifier localement la distribution spatiale des transmissivités et des coefficients d'emmagasinement sur la base de la connaissance des processus hydrogéologiques régionaux estimés par des experts à partir de cartes piézométriques de référence. Les critères statistiques et les comparaisons visuelles sont aussi utilisés pour identifier rapidement les endroits où les ajustements prioritaires doivent être réalisés. À titre d'exemple, le biais et l'écart quadratique moyen (RMSE) sont de bons indicateurs qui permettent d'ajuster les transmissivités. Le rapport des écarts-types simulés

21. Le paramètre k définit une vitesse d'écoulement entre cellules du modèle de Muskingum.

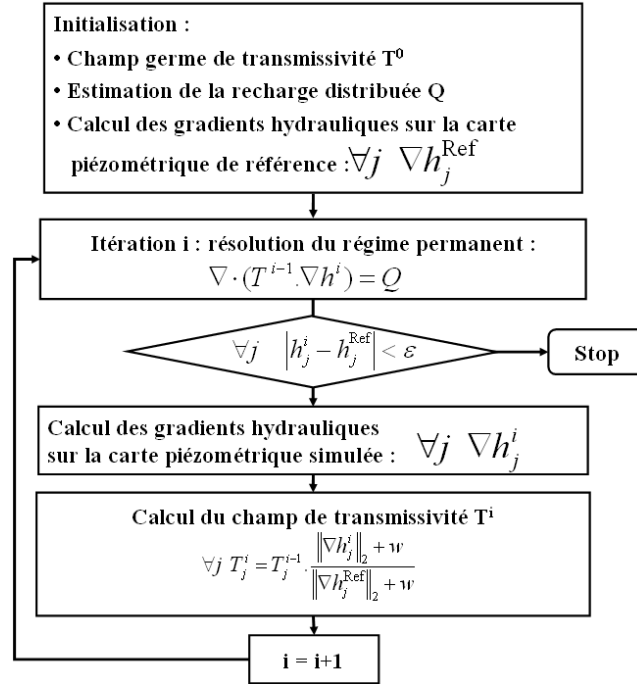


FIGURE 2.11: Algorithme d'inversion par estimation successive des flux. D'après Pasquier and Marcotte (2006) adapté par Lotteau (2010); Monteil (2011)

sur écarts-types observés, calculés à partir des niveaux piézométriques, permettent d'identifier les endroits où le coefficient d'emmagasinement doit être localement ajusté.

Le champ de transmissivité peut être ajusté manuellement ou à l'aide de la méthode par estimation successive des flux (Pasquier and Marcotte, 2006). Cette méthode s'inspire du modèle de comparaison (Ponzini and Lozej, 1982) qui utilise le rapport des gradients de charge hydraulique observés et simulés à l'aide d'un régime permanent pour modifier localement le coefficient de transmissivité sans avoir recours à une méthode complexe d'optimisation linéaire ou non-linéaire. Cette méthode est simple à mettre en œuvre et mène à de bons résultats pour des aquifères de grande extension spatiale (Vassena et al., 2008). Afin de réduire les temps de calcul, cette méthode est appliquée sur la base d'un régime permanent (Henriksen et al., 2003) caractéristique des basses eaux. La résolution de ce régime permanent permet d'obtenir un premier champ de transmissivités cohérent avec le champ piézométrique observé. La méthode par estimation successive des flux couple un algorithme itératif d'inversion avec un modèle aux éléments finis (Pasquier, 2005; Pasquier and Marcotte, 2006) ou aux différences finies sur grille décalée (Lotteau, 2010; Monteil, 2011; Flipo et al., 2012) qui résout l'équation de diffusivité (eq. A.8, p.101) en régime permanent.

L'inversion par estimation successive des flux s'effectue en plusieurs étapes (Fig. 2.11). Tout d'abord un champ de transmissivités est nécessaire pour initialiser le modèle (appelé *champ germe*) et un champ spatial de gradient hydraulique de référence est calculé sur la base

d'une carte piézométrique de référence²². A chaque itération $i+1$, la résolution de l'équation de diffusivité en régime permanent est réalisée en utilisant le champ de transmissivités calculé à l'itération i . Si le champ piézométrique issu de ce calcul est identique à celui de référence $+/- \epsilon$ alors le calcul s'arrête. Sinon les transmissivités de passage sont modifiées localement en les multipliant par le ratio des gradients de la charge simulée sur le gradient de référence pondéré par un coefficient w pour stabiliser le calcul. Ensuite l'itération suivante démarre, et ce, jusqu'à ce que la convergence soit atteinte, c'est à dire qu'à chaque centre de chaque élément de calcul, la charge calculée soit égale à la charge de référence $+/- \epsilon$ (ϵ correspond au critère d'arrêt). Il est donc fondamental de disposer de cartes piézométriques fiables, d'où l'importance des techniques d'interpolation des champs piézométriques, comme discuté section 2.1.2, p.11.

2.4 Modélisation du bassin de la Loire

Cette partie résume les principaux résultats de modélisation de [Flipo et al. \(2012\)](#) (annexe D.1, p.128), pour l'aquifère de Beauce, et de [Monteil \(2011\)](#) pour l'ensemble du bassin de la Loire.

2.4.1 Brève description du bassin et conceptualisation du modèle

Le bassin hydrologique de la Loire, d'une surface de 117 480 km² à Saint-Nazaire, occupe environ un cinquième du territoire français et a un relief très varié. En amont du bassin, l'altitude est élevée, notamment au sud avec le Massif Central où elle dépasse 1500 m. Le relief s'aplanit vers l'aval, laissant la place à des plaines comme celle de la Beauce par exemple. La Loire, d'une longueur de 1013 km, prend sa source en Ardèche au mont Gerbier de Jonc. Le régime hydrologique est de type pluvial avec une période de hautes eaux en hiver et de basses eaux en été. Ce régime est très irrégulier combinant de fortes crues d'origine cévenole et/ou océanique²³ avec des étiages sévères. Ainsi, le débit journalier moyen à Saint-Nazaire (exutoire du bassin) descend à 130 m³.s⁻¹ pour les étiages quinquennaux et peut atteindre 5100 m³.s⁻¹ pour la crue vicennale²⁴. Les principaux affluents de la Loire sont l'Allier, le Cher, l'Indre et la Vienne pour la rive gauche, et la Maine en rive droite. Le réseau hydrographique fait apparaître des zones de fort ruissellement où le réseau pérenne est très dense et des zones de forte infiltration où il est quasiment inexistant. Le débit du fleuve est partiellement régulé par deux principaux barrages, Villerest sur la Loire et Naussac sur l'Allier, qui contribuent au soutien des étiages de la Loire et à l'écêtement des crues (Fig. 2.12).

La géologie du bassin-versant de la Loire est très contrastée. Le centre est constitué de roches sédimentaires appartenant à la partie sud du bassin parisien. De part et d'autre se trouvent des massifs cristallins : le Massif Central au sud-est et le Massif Armoricaïn à l'ouest. La carte géologique indique que les formations sédimentaires se trouvent dans une zone qui correspond approximativement à la Loire moyenne (région Centre). C'est donc cette zone,

22. Dans la mesure du possible le champ piézométrique de référence correspond à une situation de basses eaux. Il s'agit habituellement de cartes piézométriques établies lors de campagnes de mesures synchrones des niveaux d'eau (section 2.1.1, p.10).

23. La combinaison de ces deux phénomènes a engendré les crues historiques centenales de la fin du 19^{ème} siècle.

24. Source : <http://www.hydro.eaufrance.fr>

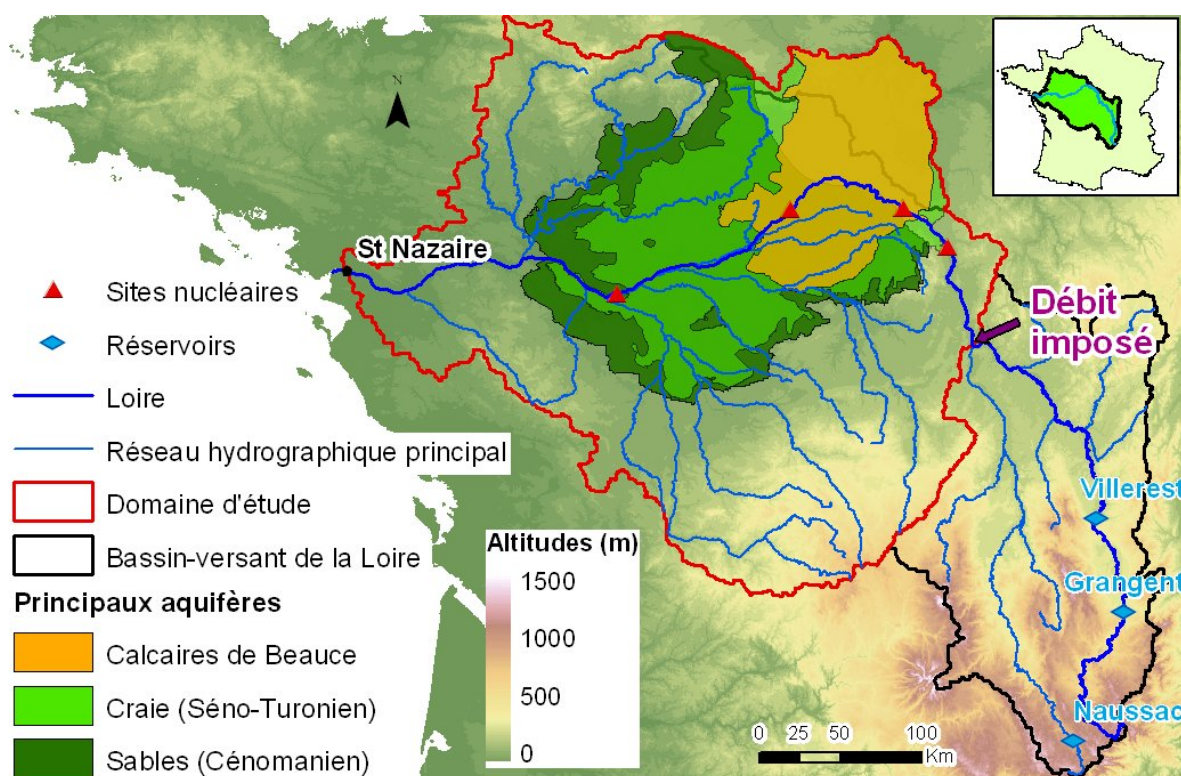


FIGURE 2.12: Conceptualisation du modèle distribué de la Loire. D'après [Monteil \(2011\)](#).

qui présente des couches aquifères superposées (Beauce, Craie sénno-turonienne et sables céno-manien, depuis la surface vers la profondeur), qui est plus particulièrement étudiée (Fig. 2.12).

Les études menées par [Sogreah \(2004, 2006\)](#) suggèrent peu d'échanges entre le Cénomanien et la nappe de l'Albien sous-jacente qui est isolée par les argiles du Gault. En conséquence, le domaine d'étude repose sur le mur des sables céno-manien. Trois formations aquifères ont été retenues pour la modélisation des apports à la Loire : les calcaires de Beauce, la craie sénno-turonienne et les sables céno-manien. La position de la crête piézométrique entre le bassin hydrogéologique de la Loire et celui de la Seine fluctue au cours du temps. Pour pouvoir prendre en compte cette variabilité, le domaine d'étude a été étendu jusqu'à la Seine. Le domaine étudié s'appuie initialement sur les contours du bassin versant topographique de la Loire.

La zone d'intérêt de l'étude étant la partie centrale du bassin, il a été décidé d'imposer le débit mesuré en aval de la confluence Loire-Allier. Ce forçage permet de se passer de modéliser le fonctionnement des barrages-réservoir et des aquifères en amont du bassin. Au final, le domaine d'étude couvre une surface d'environ 90 000 km² (Fig. 2.12). Les impluviums des formations retenues sont de 12 700 km² pour la Beauce, 17 200 km² pour la craie sénno-turonienne et 8 800 km² pour les sables céno-manien, soit une surface totale d'impluvium de 38 700 km². Afin de caractériser le fonctionnement de l'hydrosystème, des chroniques de débits et de piézométries sont disponibles en 158 stations hydrométriques et 196 piézomètres. Certaines stations sont renseignées sur toute la période 1970-2009, d'autres sur quelques années seulement.

Les prélèvements d'eau dans le bassin de la Loire sont dédiés aux usages industriels, agricoles (irrigation), d'alimentation en eau potable ainsi qu'à la production d'énergie. L'eau est prélevée en surface (cours d'eau, retenues), en nappe alluviale ou en nappe profonde. La répartition dans l'année n'est pas homogène. Par exemple, les prélèvements liés à l'irrigation ont majoritairement lieu en été. Sur la période 1998-2006, la part des prélèvements en nappe profonde pour les 90 000 km² étudiés correspond à 46 % des prélèvements totaux. La part des volumes évaporés par les centrales nucléaires pour la production d'énergie représente 14 % des prélèvements totaux. Sur la zone où les aquifères sont simulés, 70 % des prélèvements proviennent des aquifères. Enfin, en limitant le bilan à l'extension de l'aquifère de Beauce au nord de la Loire, 85 % des prélèvements sont réalisés en nappe profonde, ce qui montre l'importance de cette ressource en eau. 38 % des prélèvements souterrains ont lieu sur 9 % de la surface du domaine d'étude (Beauce nord). Sur la période 1998-2006, le volume annuel moyen prélevé en nappe profonde est de l'ordre de 456 Mm³ répartis en 56 % pour l'irrigation, 37 % pour l'AEP et 7 % pour les industries. Ces volumes sont prélevés pour 53 % en Beauce, 29 % dans la nappe de la Craie et 18 % dans les sables du Cénomanien.

Le modèle EauDyssée (Annexe A, p.96) de ce système comprend un total de 174 654 paramètres à ajuster :

- Module de bilan hydrique en surface : 22 fonctions de production soit $7 \times 22 = 154$ paramètres,
- Module de routage sur les versants : temps de concentration global (1 seul paramètre),
- Module de routage en rivière : coefficient de transfert k pour chacune des 16 141 mailles rivière et débit limite d'infiltration vers le souterrain pour les 5 244 mailles rivière en lien avec le souterrain,
- Module de transfert en zone non-saturée : nombre de réservoirs et constante de temps de vidange pour chacune des 20 127 mailles souterraines en lien avec la surface,
- Module des écoulements souterrains : transmissivités et coefficients d'emmagasinement pour les 37 620 mailles souterraines, coefficients de drainances entre couches ($6\,738 + 10\,755 = 17\,493$ mailles), coefficients d'échange avec la surface (20 127 mailles).

2.4.2 Les forçages du modèle

Mises à part les données de structure nécessaires à la construction et à la paramétrisation du modèle (voir [Monteil \(2011\)](#) pour plus de détails), les forçages à proprement parler du MMD couplé surface-souterrain du bassin de la Loire sont la chronique des débits observés à la station de Cours-les-Barres et les forçages atmosphériques. Les autres conditions limites du modèles sont de type charge imposée au niveau de la Seine et flux nul pour les bordures latérales des aquifères simulés ainsi qu'au mur des sables du Cénomanien. Les forçages atmosphériques, précipitation et ETP (EvapoTranspiration Potentielle), sont définis à partir des ré-analyses SAFRAN réalisées par Météo France sur une grille de 8 km de côté ([Durand et al., 1993](#); [Quintana-Seguí et al., 2008, 2009](#); [Vidal et al., 2010a,b](#)).

2.4.3 Ajustement du modèle

L'ajustement du modèle consiste à calibrer une paramétrisation des modules de surface, du module souterrain et des interfaces d'échange entre modules qui soit validée et robuste. La méthode hybride d'ajustement (section 2.3.3, p.29), couplant ajustements manuel et automatique, en boucles imbriquées (section 2.3.3.2, p.30) a été mise en œuvre suivant trois

étapes : pré-calage du bilan hydrique en surface, calage mono-couche de l'aquifère de Beauce nord puis calage multi-couche. La calibration a été réalisée sur une période de 10 ans, le test sur une autre période de 10 ans indépendante de la première, et la phase de validation a été réalisée avec l'ensemble des données disponibles sur 35 ans (1974-2009).

L'ajustement de l'aquifère de Beauce nord est basé sur une hypothèse de substratum imperméable à la base de l'aquifère afin d'utiliser la procédure d'inversion par estimation successive des flux (Fig. 2.11, p.33). La qualité du calage est estimée par une comparaison visuelle des chroniques mesurées et simulées et par l'utilisation de critères tels que le biais, la RMSE²⁵ ou la corrélation. Lors de la simulation initiale, le biais global calculé sur toutes les chroniques piézométriques de Beauce nord était de 6,7 m avec une majorité de piézomètres où le niveau était sous-estimé de plus de 5 m. En utilisant l'inversion par estimation successive des flux avec la carte de transmissivité initiale comme champ germe, la RMSE globale est réduite à 5,8 m et le nombre de piézomètres où le biais est compris entre -2 et +2 m augmente. En combinant calage manuel et inversion pour déterminer les transmissivités et en jouant également sur les coefficients d'emménagement et d'échanges nappe-rivière, la RMSE globale pour l'aquifère de Beauce nord est de 2,2 m, avec une distribution des biais satisfaisante. D'un point de vue méthodologique, il a été observé que le champ de transmissivités permet d'ajuster le niveau piézométrique moyen et les tendances à long terme, et que le coefficient d'emménagement influe plutôt sur les amplitudes des variations plus rapides. Pour la méthode d'estimation successive des flux, le champ de transmissivités obtenu par inversion est très sensible à l'estimation de la recharge correspondant à la carte piézométrique de référence. Pour plus d'information sur l'ajustement de cette partie de l'hydrosystème Loire, le lecteur est invité à consulter Flipo et al. (2012) (Annexe D.1, p.128).

Une fois la partie Beauce nord ajustée pour une période de 35 ans, l'ajustement a été poursuivi en prenant en compte les autres couches du modèle en relaxant l'hypothèse d'imperméabilité entre les aquifères de Beauce nord et de la Craie séno-turonienne. La méthode d'inversion par estimation successive des flux s'applique mal au calage multi-couche pour plusieurs raisons :

1. il faut disposer d'une carte piézométrique de référence définie sur l'ensemble de l'aquifère étudié ce qui n'est pas le cas pour la Craie.
2. il est difficile de définir les conditions limites pour les parties captives des aquifères, alors que dans le cas d'une nappe libre, les cotes imposées aux mailles rivières permettent d'obtenir plus facilement une convergence du code d'inversion.
3. les flux verticaux entre aquifères sont mal connus, ce qui perturbe l'estimation de la recharge.

En conséquence, la poursuite du calage des deux autres couches du modèle souterrain a été réalisée de manière manuelle sans modifier les paramètres hydrodynamiques de la Beauce. Durant la calibration des paramètres contrôlant la dynamique souterraine, les RMSE globales calculées sur les chroniques des piézomètres situés dans la Craie et dans le Cénomaniens sont progressivement améliorées (Fig. 2.13). Chaque point de la figure correspond à une itération de calage. Initialement, les RMSE sont supérieures à 10 m pour ces deux aquifères. Après calage, la RMSE est de 3.0 m pour la Craie et 3.2 m pour le Cénomaniens, ce qui constitue une amélioration très significative des performances du modèle.

Finalement, le modèle ajusté permet de bien simuler les débits et piézométries observés sur l'ensemble du domaine pour les 35 années simulées. L'écart quadratique moyen est de 2,86 m

25. Écart quadratique moyen

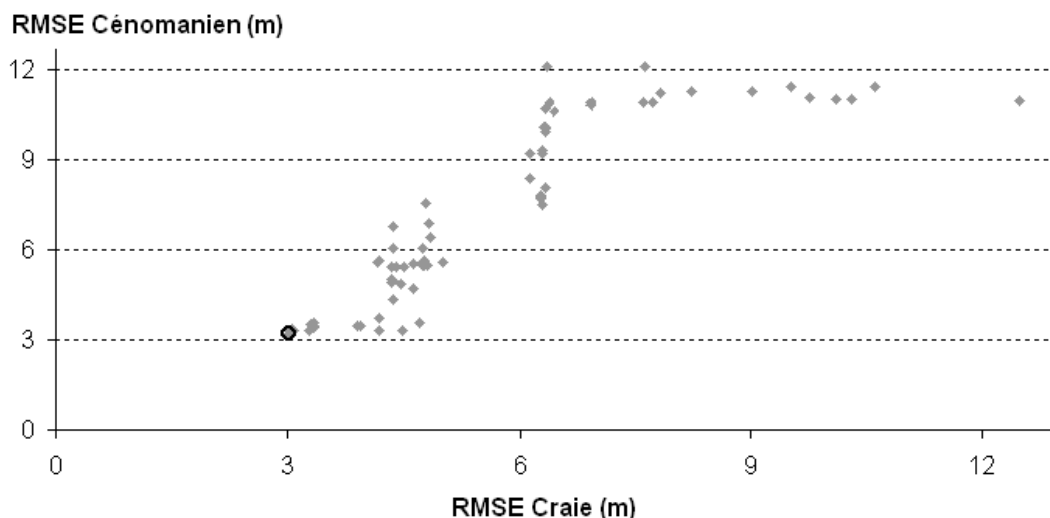


FIGURE 2.13: Ajustement du modèle Loire - Évolution des RMSE par aquifère au cours du calage. Le point encerclé correspond à l'état obtenu à l'issue du calage. D'après [Monteil \(2011\)](#).

calculé avec 197 piézomètres. Pour la composante de surface, les critères de Nash aux stations en Loire sont tous supérieurs à 0,9²⁶, et atteint 0.95 à la station de Saint Nazaire située à l'exutoire du bassin.

2.4.4 Fonctionnement hydrologique du bassin

Le modèle permet d'établir un bilan de fonctionnement des aquifères de la Loire moyenne sur 35 ans (Fig. 2.14). Ainsi, en moyenne annuelle entre 1974 et 2009, il est établi que la pluie efficace correspond à près du quart des précipitations. Le système aquifère est alimenté à 93 % par l'infiltration sur les versants et 7 % par infiltration de l'eau des rivières. 89 % de ce volume d'eau infiltré sont restitués à la surface sous forme de drainage par les cours d'eau, et 9 % sont prélevés pour l'irrigation, l'AEP, et par les industries. Pour les trois aquifères, l'évapotranspiration réelle représente près des trois quarts des précipitations. Un peu moins d'un quart des précipitations est donc disponible en pluie efficace pour les écoulements de surface et l'infiltration. 65 % de la pluie efficace est infiltrée pour la Beauce, 68 % pour la Craie et 70 % pour le Cénomanien, ce qui indiquerait une capacité de recharge similaire pour les aquifères. Globalement, le modèle simule une diminution moyenne du stock d'eau de 92 $\text{Mm}^3.\text{an}^{-1}$.

Le bilan de la variation du stock, et notamment de son signe, est très sensible à la période sur laquelle la moyenne annuelle est calculée. Ainsi, la variation de stock calculée pour une seule année varie entre -1900 et +2800 $\text{Mm}^3.\text{an}^{-1}$. Afin de préciser la temporalité des dynamiques de recharge du système aquifère, les variogrammes des différentes composantes du cycle de l'eau ont été calculés au pas de temps annuel à partir de la simulation réalisée. Un modèle linéaire de co-régionalisation (Annexe B, p.104) a ensuite été ajusté²⁷ pour toutes les composantes du cycle de l'eau. Cet ajustement a permis d'identifier trois canaux temporels (Tab. 2.4). Cependant, en ne considérant pas toutes les composantes du cycle de l'eau, [Flipo](#)

26. Un critère de Nash de 1 traduit le fait que le modèle reproduit parfaitement les observations

27. L'ajustement conjoint multi-variable a été réalisé à l'aide du logiciel RGeOS

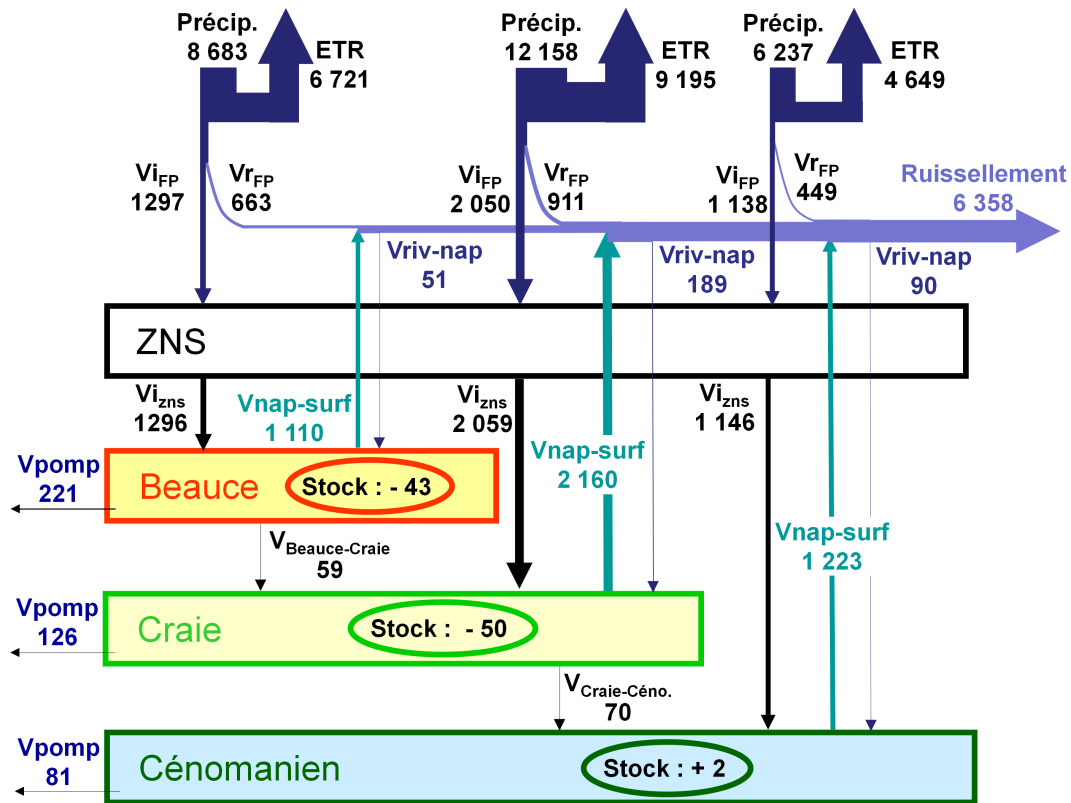


FIGURE 2.14: Bilan du fonctionnement hydrologique de la Loire : volumes moyens annuels (Mm^3) sur la période août 1974 - juillet 2009.

Notations utilisées : **Précip.** : précipitations, **ETR** : évapotranspiration réelle, **V_{iFP}** : volume d'eau infiltré à la surface, **V_{rFP}** : volume d'eau ruisselé, **V_{iZNS}** : volume d'eau transmis par la zone non-saturée, **$V_{nap-surf}$** : volume d'eau exfiltré des nappes vers la surface, **$V_{riv-nap}$** : volume d'eau de rivière ré-infiltré vers les nappes, **$V_{Beauce-Craie}$** et **$V_{Craie-Céno.}$** : volumes échangés entre aquifères, **V_{pomp}** : volume d'eau prélevé par pompage, **Stock** : volume stocké dans l'aquifère. D'après (Monteil, 2011).

et al. (2012) ont montré que l'ajustement du modèle linéaire de co-régionalisation pour la Beauce ne faisait apparaître que deux canaux temporels structurés en un signal pépitique et un signal périodique. En effet, seule l'ETP comporte une tendance linéaire qui biaise l'ajustement conjoint. Il apparaît donc que la variation de stock est stationnaire. En supposant que EauDyssée reproduise parfaitement la réalité, il semble que la ressource en eau souterraine de la Loire centrale soit en diminution de $92 Mm^3.an^{-1}$ du fait d'une légère sur-exploitation de la ressource. De plus, en négligeant la composante linéaire de l'ajustement conjoint, la variation du stock s'explique à 75.9 % par un modèle pépitique et à 23.7 % par un modèle périodique de période 17.2 ans²⁸. Ce signal périodique de 17 ans a aussi été identifié pour les débits de la Seine à Poses (station hydrométrique située à l'estuaire de la Seine) et pourrait être lié à des fluctuations climatiques (Massei et al., 2010).

28. Cette période est à considérer avec précaution compte-tenu du fait que les chroniques étudiées couvrent une période de seulement 35 ans.

Variogramme	ETP	Precip	ETR	Peff	Qi_FP	Qnap_surf	Qr	Vstock
Pépitique	2613	16870	3590	6704	2746	116	901	718
Linéaire	5327	381	947	108	114	107	17	4
Périodique	631	2994	200	1764	778	280	200	224

TABLE 2.4: Ajustement du modèle linéaire de co-régionalisation pour chaque composante du cycle de l'eau de l'hydrosystème Loire (en $(\text{mm.an}^{-1})^2$). D'après (Monteil, 2011).

2.5 Résumé et Conclusion

Indispensables à la compréhension et au suivi du fonctionnement des hydrosystèmes, les cartes piézométriques sont établies à l'aide de techniques d'interpolation. Une comparaison entre des techniques géostatistiques et un nouvel interpolateur spatial basé sur la logique floue (GEO-ANFIS) a été réalisée. Sans conteste, la géostatistique est très supérieure à GEO-ANFIS dans la mesure où elle permet d'accéder à des informations sur la fiabilité des valeurs interpolées. De plus, les interpolations sont plus fiables et moins sensibles aux données d'entrée. L'utilisation de cartes piézométriques permet de mettre en œuvre des techniques de calibration automatique de modèles simulant les écoulements souterrains via des approches inverses. Ce potentiel a été exploité par la conceptualisation d'une méthodologie hybride d'ajustement de MMD d'hydrosystème. Cette méthodologie a pour objectif d'éviter la sur-paramétrisation d'un modèle lors de la phase de calibration. Pour ce faire un troisième jeu de données est utilisé en sus des jeux traditionnels de calage et validation. Une première application de la méthode a été réalisée dans le cadre de l'étude de l'hydrosystème Loire, et plus particulièrement de l'aquifère de Beauce où la technique d'inversion par estimation successive des flux a été mise en œuvre. Finalement les simulations réalisées avec EauDyssée, couplées à l'utilisation du modèle linéaire de co-régionalisation pour analyser les différentes composantes du cycle de l'eau, mènent à la conclusion que la variation annuelle du stock d'eau contenu dans le système aquifère de la Loire centrale est une variable stationnaire. La valeur moyenne de la variation annuelle du stock, calculée sur 35 ans, est de -92 Mm^3 , ce qui, en supposant le modèle parfait, traduit le fait que le système aquifère est en légère sur-exploitation.

Chapitre 3

Hydrologie des interfaces nappe-rivière

Matériel de référence

Ce chapitre s'appuie directement sur [Flipo \(2012\)](#); [Flipo and Mouhri \(2013\)](#), [Saleh et al. \(2011\)](#) (Annexe D.3, p.160), et [Mouhri et al. \(2013a\)](#), qui synthétisent les résultats de [Flipo et al. \(2009\)](#); [Mouhri et al. \(2011, 2012a, 2013b\)](#). Les travaux de [Flipo et al. \(2013c\)](#); [Monteil \(2011\)](#); [Mouhri et al. \(2012b\)](#); [Saleh \(2010\)](#); [Saleh et al. \(2010, 2012, 2013\)](#) ont aussi servi de support à certaines parties de ce chapitre.

3.1 Retour sur le concept d'hydrosystème

3.1.1 Hydrosystèmes et interfaces emboîtées

Les eaux surfaciques et souterraines ont fait historiquement l'objet d'études séparées ([Brunke and Gonser, 1997](#); [Dawson, 2008](#); [Kalbus et al., 2006](#)). L'émergence d'une vision systémique du cycle de l'eau a fait émerger le concept d'hydrosystème ([Dacharry, 1993](#); [Dooge, 1968](#); [Kurtulus et al., 2011](#); [Flipo et al., 2012](#)), comme présenté en introduction (section 1.2, p.3). L'hydrosystème constitue un continuum hydrique dans lequel sont regroupés, eu égard aux ordres de grandeur significativement différents des temps de transfert de l'eau ([Blöschl and Sivapalan, 1995](#)), des composantes de stockage dans lesquelles les eaux s'écoulent lentement (e.g., les aquifères), et des composantes conductives où de grandes quantités d'eau s'écoulent rapidement (e.g., les eaux de surface). Les hydrosystèmes continentaux peuvent donc être conceptualisés par différents compartiments présentant des cinétiques et phénoménologies distinctes. Les deux compartiments principaux sont le domaine de surface et le domaine souterrain qui sont reliés par des interfaces constituées de cascades d'objets emboîtés (Fig. 3.1). Par exemple l'interface nappe-rivière est souvent constituée, à l'échelle régionale, par une plaine alluviale, alors qu'à l'échelle de la plaine alluviale, cette interface est constituée par la zone riparienne, au sein de laquelle l'interface nappe-rivière est constituée par la zone hyporhéique (ZH), et ainsi de suite jusqu'à l'interface eau-benthos ([Flipo, 2012](#)).

Les flux entre compartiments de l'hydrosystème se trouvent donc connectés via des interfaces communes dont la représentation varie en fonction de l'échelle d'analyse. Elles n'en demeurent pas moins très structurantes pour la modélisation des flux : une interface nappe-

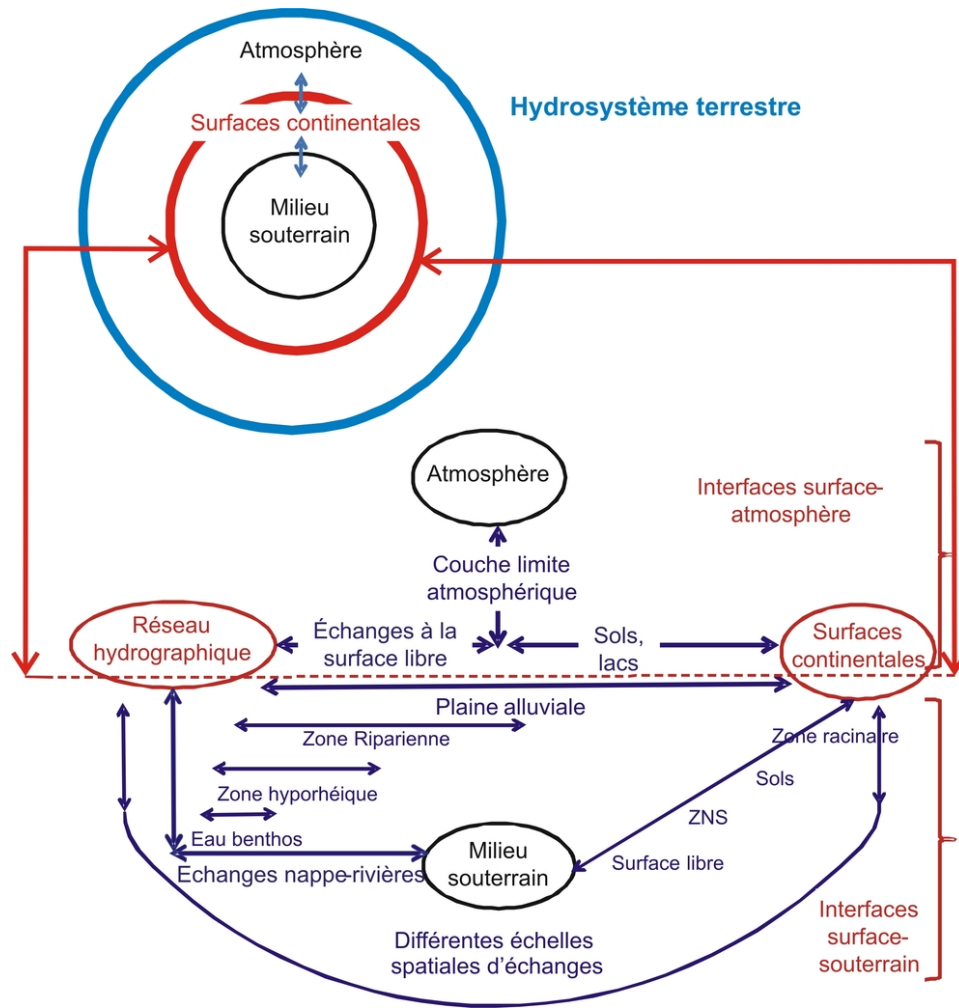


FIGURE 3.1: Décomposition de l'hydrosystème autour des interfaces continentales constituées d'objets emboîtés. D'après Flipo (2012)

rivière demeurant une interface nappe-rivière quelle que soit l'échelle. Cette vision de l'hydrosystème structuré autour de ses interfaces est, de plus, en accord avec les classifications hydro-bio-géologiques actuelles des paysages (Bertrand et al., 2012; Dahl et al., 2007).

3.1.2 Transmission des signaux hydrologiques au sein des hydrosystèmes

À l'échelle d'un hydrosystème continental, constitué de ses composantes de stockage, de transmission et de ses interfaces, le signal hydrologique peut ainsi être décomposé en bandes fréquentielles¹ :

1. Transmission d'un signal temporel haute fréquence par les processus de surface
2. Transmission d'un signal temporel basse fréquence par les processus souterrains

1. La caractérisation haute et basse fréquence de ce mémoire est à considérer en relatif au sein de l'hydrosystème et non pas dans le référentiel absolu de la physique en général.

3. Transmission d'un signal temporel moyenne-basse fréquence par les interfaces sol - zone non-saturée
4. Transmission d'un signal temporel haute-moyenne fréquence par les interfaces nappe-rivière

Ainsi un signal hydrologique $Z(X, t)$ peut être décomposé en composantes temporelles ou canaux représentatifs de processus :

$$Z(X, t) = \sum_{i=1}^N Z_i(X, t) \quad (3.1)$$

avec X correspondant au vecteur coordonnées, et t le temps.

Cette décomposition peut alors servir de base à une analyse fonctionnelle du système ainsi qu'à l'analyse des écarts simulations (S) - observations (O) à l'aide du modèle linéaire de co-régionalisation (Voir Annexe B, p.104), qui permet de quantifier la relation entre les différentes composantes de deux signaux en termes de variabilité et de dynamique (coefficients de corrélation et rapports de paliers). L'analyse du système peut alors être menée par canal ou "bande phénoménologique", qui correspond à un phénomène se développant à une échelle spatiale et temporelle donnée.

3.2 Conceptualisation des interfaces nappe-rivière à différentes échelles

Si l'interface "sol" a fait l'objet de nombreux travaux en termes expérimentaux et de modélisation pour arriver à un projet de modélisation et d'observation satellitaire du cycle de l'eau dans les enveloppes continentales avec une résolution spatiale de $1\text{km} \times 1\text{km}$ (Beven and Cloke, 2012; Wood et al., 2011, 2012), il n'en va pas de même des interfaces nappe-rivière qui ne sont apparues que récemment comme étant des éléments clé du fonctionnement hydro-bio-géochimique des hydrosystèmes continentaux présentant une très forte variabilité spatio-temporelle des processus (Brunke and Gonser, 1997; Krause et al., 2009c). L'étude par la communauté hydro-écologique a permis de repenser le cycle de l'eau passant de la notion de rivière comme drain étanche qui collecte l'eau de pluie et la conduit directement à la mer à une vision moins restrictive et plus complexe, intégrant toutes les dimensions des hydrosystèmes. La dimension verticale s'illustre alors par le fait qu'avant de rejoindre la mer, une molécule d'eau de pluie peut, de multiples fois, sur des distances variant du centimètre à la centaine de kilomètres, et pour des durées allant de quelques secondes à plusieurs années, être échangée entre la rivière et sa nappe (Datry et al., 2008). Ainsi ces interfaces nécessitent d'être étudiées de manière plus approfondie afin de mieux caractériser le fonctionnement hydrogéologique des bassins (Hayashi and Rosenberry, 2002). Cependant le problème se pose très différemment suivant les échelles spatiales d'analyse. La nomenclature suivante est donc adoptée dans la suite de ce mémoire (légèrement adaptée de Blöschl and Sivapalan (1995) pour la composante régionale) :

- Échelle locale (du site expérimental) : les quantifications expérimentales ou spécifiques à un site donnent un aperçu des processus dans la zone d'interface entre la nappe et la rivière (1 m - 100 m). Cette échelle concerne surtout le lit de la rivière, ou zone hyporhéique (cf. section 3.2.2, p.47).
- Échelle intermédiaire : un lac ou un tronçon de rivière (1 km - 10 km)

- Échelle régionale : la quantification des échanges nappe-rivière est placée dans le contexte hydro(géo)logique global de l'hydrosystème ($> 1\,000\text{ km}^2$).

3.2.1 Un problème multi-échelle structuré autour de l'échelle intermédiaire - La rivière

Ellis et al. (2007) ont étudié la pertinence des plans d'échantillonnage et de modélisation spatio-temporels de cette interface depuis l'échelle intermédiaire à de longues échelles temporelles jusqu'à l'échelle locale dans le lit de la rivière pour des pas de temps de l'ordre de la seconde. Ils en conclurent que la distribution des échanges nappe-rivière est soumise à des facteurs multi-échelle qui influencent à la fois l'épaisseur de la zone hyporhéique (échelle locale) et les écoulements souterrains au travers du lit de la rivière (échelle intermédiaire).

D'après une étude bibliographique du fonctionnement des interfaces nappe-rivière, avec une attention particulière portée sur leur modélisation à l'aide de MMD (Tab. 3.1), il apparaît que les écoulements souterrains dans le champ proche de la rivière sont, en premier lieu, contrôlés par les écoulements régionaux dans les systèmes aquifères (Malard et al., 2002). En effet, pour la composante souterraine du cycle de l'eau, ce sont les écoulements régionaux vers les plaines alluviales et leurs rivières qui déterminent la quantité d'eau qui va circuler dans l'interface nappe-rivière (Cardenas and Wilson, 2007a; Frei et al., 2009; Kalbus et al., 2009; Rushton, 2007; Storey et al., 2003). En effet, à cette échelle le réseau hydrographique constitue essentiellement un réseau de drainage des eaux vers lequel les eaux souterraines s'écoulent pour lui fournir son débit d'étiage (Ellis et al., 2007; Pinder and Jones, 1969; Tóth, 1963). Ces grandes hétérogénéités structurelles peuvent aussi engendrer localement des zones privilégiées de réinfiltration des eaux de la rivière vers la nappe (Boano et al., 2010; Cardenas, 2009b,a; Fleckenstein et al., 2006), qui peuvent être prépondérantes dans l'alimentation du milieu local (Krause and Bronstert, 2007; Krause et al., 2007).

En second lieu, dans la plaine alluviale et dans le champ proche de la rivière, la distribution spatiale de la perméabilité du lit de la rivière et du milieu poreux sous-jacent contrôlent la dynamique des échanges nappe-rivière (Calver, 2001; Fleckenstein et al., 2006; Frei et al., 2009; Genereux et al., 2008; Hester and Doyle, 2008; Kalbus et al., 2009; Kaser et al., 2009; Rosenberry and Pitlick, 2009). Viennent ensuite la morphologie et la topographie du fond de la rivière (Cardenas et al., 2004; Gooseff and McGlynn, 2005; Frei et al., 2010; Harvey and Bencala, 1993; Kasahara and Wondzell, 2003; Kasahara and Hill, 2006b; Sawyer and Cardenas, 2009; Sawyer et al., 2011; Storey et al., 2003; Tonina and Buffington, 2007), ainsi que la profondeur de l'aquifère alluvial (Koch et al., 2011; Marzadri et al., 2010; Whiting and Pomeranets, 1997), et le régime hydraulique de la rivière (Cardenas and Wilson, 2007c; Munz et al., 2011; Saenger et al., 2005).

Il est donc important d'étudier les échanges nappe-rivière dans une double perspective régionale et locale, en estimant tout d'abord les flux d'eaux souterraines alimentant les interfaces nappe-rivière, puis en essayant de quantifier la distribution spatiale le long du réseau hydrographique en prenant en compte les circulations plus locales au sein de la ZH (Schmidt et al., 2006), qui sont contrôlées par la perméabilité du lit d'une part et la morphologie du fond de la rivière d'autre part (mouilles et seuils naturels ou non). Le corridor fluvial constitue la clé de voûte de ces analyses à deux échelles opposées.

TABLE 3.1: Modélisations des échanges nappe-rivière à base physique

Auteurs	Modèle	Éch	Représé	Résolution Δx	Δt	Échelle	Étude
Brunner et al. (2009a,b)	HGS	condu	2D verti lat	[1-100]m*[≤ 0.05]m	perm	loc-int	hypo
Brunner et al. (2010)	HGS, MODFLOW	condu	2D verti lat	[1-10]m*[0.1-10]m	perm	loc-int	hypo
Cardenas et al. (2004)	MODFLOW	condu	3D	0.25m*0.25m*0.04m	perm	loc	hypo
Cardenas and Wilson (2007a,b)	CFD-ACE + COMSOL	conti	2D verti lon	0.01m*0.01m [†]	perm	loc	hypo
Cardenas (2009b)	COMSOL	conti	2D hori	NS [†]	perm	loc	hypo
Chen and Chen (2003)	MODFLOW	condu	3D	[3-6]m*[3-6]m*[6-7-7-6]m	minutes	loc-int	réel
Discacciati et al. (2002)	×	conti	3D	[0.5-5]m*[0.5-5]m*[0.3-1.5]m [†]	perm	loc	hypo
Ebel et al. (2009)	INHM	condu	3D	[1-20]m*[1-20]m*[0.05-0.25]m	adapt	loc-int	réel
Engeler et al. (2011)	FLORIS+SPRING	condu	3D	[1-50]m*[1-50]m*[1.6-40]m	900s	int	réel
Fleckenstein et al. (2006)	MODFLOW	condu	3D	200m*100m*[5-40]m	3h	int	réel
Frei et al. (2009)	PARFLOW	conti	3D	20m×50m×0.5m	minutes	int	hypo
Frei et al. (2010)	HGS	condu	3D	0.1m×0.1m×0.1m	adapt	loc	hypo
Goosseff et al. (2006)	MODFLOW	condu	2D verti lon	0.20m*[0.3-0.5]m	perm	loc	hypo
Hester and Doyle (2008)	HEC-RAS+MODFLOW	condu	2D verti lon	3m*[0.1-0.25]m	perm	loc	hypo
Irvine et al. (2012)	HGS	condu	3D	0.5m*[0.5-2.6]m*[0.03-0.7]m	perm	loc	hypo
Kabus et al. (2009)	HEATFLOW	condu	2D verti lon	1m*[0.05-0.2]m	perm	loc	hypo
Kasahara and Wondzell (2003)	MODFLOW	condu	3D	[0.3-0.5]m*[0.3-0.5]m*[0.15-0.3]m	perm	loc-int	réel
Kasahara and Hill (2006b)	MODFLOW	condu	3D	[0.6-3.5]m*[0.2-0.5]m*[0.15m	perm	loc	réel
Koch et al. (2011)	MODFLOW	condu	3D	NS [†]	1h	int	réel
Krause and Bronstert (2007)	WASIM+MODFLOW	condu	2D hori	[25-50]m*[25-50]m	1h	int	réel
Krause et al. (2007)	WASIM+MODFLOW	condu	2D hori	[25-250]m*[25-250]m	1h	int-rég	réel
Lantz and Siegel (2006)	MODFLOW	condu	3D	0.5m*0.5m*[0.6-2]m	perm	loc-int	réel
Marzadri et al. (2010)	×	condu	3D	[0.19-1.88]m*[0.06-0.5]m*[0.1]m	perm	loc-int	hypo
Marzadri et al. (2011)	×	condu	3D	NS [†]	perm	loc	hypo
Miglio et al. (2003)	×	conti	3D	[0.2-0.5]m*[0.2*0.5]m*[0.05-0.15]m [†]	600s	loc	hypo
Munz et al. (2011)	MODFLOW	condu	3D	0.5m*0.5m*[0.1-2.48]m	1h [†]	loc	réel
Osman and Bruen (2002)	MODFLOW	condu	2D verti lat	NS [†]	perm	loc	hypo
Peyrard et al. (2008)	COMSOL	conti	2D hori	[10-40]m*[10-40]m	adapt	int	réel
Reveli et al. (2008)	×	condu	2D hori	NS [†]	perm	int	hypo
Rushon (2007)	×	condu	2D verti lat	20m*0.2m	perm	loc-int	hypo
Saleh et al. (2011)	EandDysée	condu	pseudo 3D	[1-4]km*[1-4]km*[]m	1 j	rég	réel
Saenger et al. (2005)	HEC-RAS+MODFLOW	condu	verti lon	0.1m*0.02m	perm	loc	réel
Sawyer and Cardenas (2009)	FLUENT + COMSOL	conti	2D verti lon	0.01m*0.005m [†]	perm	loc	labo
Storey et al. (2003)	MODFLOW	condu	3D	[1-8]m*[1-8]m*[0.25-0.42]m	perm	loc	réel
Sulis et al. (2010)	CATHY, PARFlow	condu	3D	[1-80]m*[1-80]m*[0.0125-0.5]m	adapt	loc-int	hypo
Tonina and Buffington (2007)	FLUENT	conti	3D	0.03m*0.03m*0.03m	perm	loc	labo
Urruiza et al. (2008)	×	conti	2D verti lon	1m*1m	perm	loc	hypo
Wondzell et al. (2009)	MODFLOW	condu	3D	[0.125-2]m*[0.125-2]m*[0.16-0.4]m	perm	loc	réel

Éch : représentation des échanges conti ; continuité ; condu : conductance ; BC : Conditions limites

Représé : représentation spatiale ; verti : verticale ; lat : latérale ; lon : longitudinale ; hor : horizontale

Résolution : Δx : spatiale ; Δt : temporelle (perm : permanent ; adapt : pas de temps adaptatif)

[†] Dimensions non spécifiées mais estimées à partir des informations contenues dans le papier

[†] Extension totale du modèle : Cardenas (2009b) : 80m*45m ; Koch et al. (2011) : 1.7km*200m*0.5m ; Marzadri et al. (2011) : 16.9m*2.6m*1.6m ;

[†] Extension totale du modèle : Reveli et al. (2008) : [0.22-4.4]km*[0.19-3.8]km ; Osman and Bruen (2002) : 360m*21m

Échelle : loc : locale ; int : intermédiaire ; régio : régionale

Étude : hypo : cas synthétique ; labo : expérience de laboratoire ; réel : étude de terrain

3.2.2 L'interface nappe-rivière à l'échelle locale - La Zone Hyporhéique

Les interfaces nappe-rivière sont des zones de mélange des eaux superficielles et souterraines (Sophocleous, 2002). À l'échelle locale, l'interface nappe-rivière est définie comme la zone hyporhéique (ZH) qui est un écotone² dont l'extension varie dans l'espace et dans le temps. Cet écotone est, par définition, localisé à l'interface entre deux écosystèmes aux caractéristiques très différentes (Brunke and Gonser, 1997) : les rivières et les aquifères, qui renvoient aux deux composantes très distinctes des hydrosystèmes (cf. section 3.1.1, p.42). Au sens large, la ZH est "the saturated transition zone between surface water and groundwater bodies that derives its specific physical (e.g. water temperature) and biogeochemical (e.g. steep chemical gradients) characteristics from active mixing of surface and groundwater to provide a habitat and refugia for obligate and facultative species"³ (Krause et al. (2009b), p. 2103). White (1993) mentionne aussi que la ZH est localisée sous la rivière et dans le champ latéral proche (les berges). Ainsi Malard et al. (2002) ont identifié cinq configurations génériques de ZH qui dépendent de la structure du milieu de subsurface, ainsi que de la position d'un substratum imperméable ou semi-perméable :

1. Pas de ZH (Fig. 3.2a) : le cours d'eau coule directement sur un substratum imperméable. À noter cependant qu'une zone hyporhéique pérenne peut se développer dans les zones de forte courbure du cours d'eau (Boano et al., 2009; Cardenas, 2009b; Revelli et al., 2008)
2. Pas d'aquifère (Fig. 3.2b) : une ZH, liée à l'infiltration des eaux de surface dans le substratum et/ou les berges de la rivière, peut exister. Le substratum imperméable est situé à proximité des sédiments de la rivière
3. Existence d'une ZH dans un système nappe-rivière connecté (Fig. 3.2c) : la ZH est créée par advection des eaux de la rivière et de l'aquifère. Le substratum imperméable est situé sous l'aquifère
4. Existence d'une ZH dans un système nappe-rivière déconnecté (présence d'un milieu poreux distinct entre la rivière et l'aquifère. Ce milieu poreux ne serait pas saturé si le fond de la rivière était imperméable)) :
 - a) la ZH est créée par infiltration des eaux de la rivière sous la rivière (par d'écoulements latéraux). La zone de mélange des eaux de surface et souterraines est localisée au niveau du toit de l'aquifère à une certaine distance du fond de la rivière (Fig. 3.2d)
 - b) une ZH perchée est engendrée seulement par les eaux de la rivière sous le lit de la rivière. Soit le milieu poreux sous la rivière est très épais, soit ses propriétés de conduction de l'eau ne sont pas suffisantes pour leur permettre d'atteindre le toit de l'aquifère (Fig. 3.2e).

L'extension spatiale de la ZH est très variable et couvre plusieurs ordres de grandeur depuis le centimètre jusqu'à plusieurs centaines de mètres en fonction de l'intensité des échanges latéraux avec l'aquifère de bordure (Brunke and Gonser, 1997; Woessner, 2000; Wroblecky et al., 1998). Même au sein d'une configuration spécifique, l'extension spatiale et la nature

2. Un écotone est la zone de transition écologique entre deux écosystèmes.

3. La zone saturée de transition entre les eaux de surface et les masses d'eau souterraine, dont les propriétés physiques et biogéochimiques spécifiques dérivent du mélange actif des eaux surfaciques et souterraines pour fournir un habitat à des espèces endémiques ou non

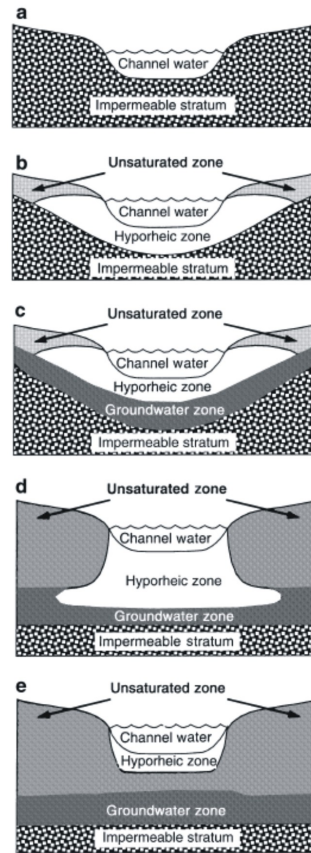


FIGURE 3.2: Différentes configurations de la ZH. D'après [Malard et al. \(2002\)](#).

de la ZH sont susceptibles de varier au cours du temps en fonction de l'évolution du contexte hydrogéologique. Ainsi [Conant \(2004\)](#); [Storey et al. \(2003\)](#) indiquent que l'extension spatiale de la ZH est modifiée par les écoulements régionaux au sein du système aquifère, alors que [Wroblicky et al. \(1998\)](#) rapportent que l'intensité même des échanges nappe-rivière, déduits des différences de charges entre la rivière et l'aquifère, rétro-agit sur l'extension spatiale de la ZH.

Les investigations à l'échelle locale s'appuient sur des travaux expérimentaux et nécessitent, afin de comprendre les écoulements tri-dimensionnels qui s'y développent, un lourd investissement expérimental mettant en œuvre une instrumentation de sites représentatifs, de l'acquisition et de l'analyse de données ([Peyrard et al., 2008](#)). Par définition elles se limitent à des zones restreintes et ne permettent que rarement d'analyser les processus à l'échelle intermédiaire ([Baxter and Hauer, 2000](#); [Mouhri et al., 2012b, 2013a](#)) comme l'indiquent le petit nombre de modélisations des interfaces nappe-rivière à l'échelle intermédiaire (Tab. 3.1).

3.2.3 Les interfaces nappe-rivière à l'échelle régionale - Les plaines alluviales

La dynamique des échanges à l'interface nappe-rivière est complexe et dépend principalement de facteurs géomorphologiques, hydrogéologiques et climatiques (Sophocleous, 2002; Winter, 1998). D'un point de vue conceptuel, les échanges nappe-rivière sont contraints par deux facteurs principaux : Le gradient hydraulique et la structure géologique du milieu. Le gradient hydraulique définit les chemins d'écoulement (Winter, 1998), et la structure géologique les propriétés hydrodynamiques du milieu (White, 1993; Dahm. et al., 2003). Ces deux facteurs sont fondamentaux pour les hydrogéologues qui en dérivent des vitesses d'écoulement et des temps de transfert. À l'échelle régionale, et par conséquent à l'échelle des hydrosystèmes continentaux comme les bassins sédimentaires, l'estimation des échanges nappe-rivière nécessite de combiner l'étude de différents processus qui ont des temps ou périodes de temps caractéristiques s'étalant sur plusieurs ordres de grandeur (Blöschl and Sivapalan, 1995; Flipo et al., 2012; Massei et al., 2010; Massei and Fournier, 2012) : horaire-journalier pour les écoulements en rivière, annuel-décennal pour la pluie efficace, décennal-siècle pour les écoulements souterrains. La compréhension de ces processus à différentes échelles spatio-temporelles nécessite d'utiliser des modèles comme interpolateur spatio-temporel, ainsi que de définir des lois de changement d'échelle (Saleh et al., 2011, 2012).

L'utilisation des MMD couplant les processus de surface et souterrains couvre une large gamme d'échelles (Tab 2.2, p.21). Cependant une analyse approfondie montre que seulement 18 publications⁴ (soit seulement 8.6 % de l'ensemble des publications consultées) concernent de grands bassins versants ($> 10\,000\text{ km}^2$) (Abu-El-Sha's and Rihani, 2007; Andersen et al., 2001; Bauer et al., 2006; Boukerma, 1987; Christiaens et al., 1995; Etchevers et al., 2001; Golaz-Cavazzi et al., 2001; Gomez et al., 2003; Habets et al., 1999b; Hanson et al., 2010; Henriksen et al., 2008; Kolditz et al., 2012a; Ledoux et al., 2007; Lemieux and Sudicky, 2010; Monteil, 2011; Park et al., 2009; Saleh et al., 2011; Scibek et al., 2007). Hormis Monteil (2011); Saleh et al. (2011), aucune d'elles ne s'intéresse à la quantification des échanges nappe-rivière à cette échelle. De plus, parmi des modèles dédiés à cette problématique, aucune application n'a été menée pour des extensions spatiales de cette ampleur (Tab. 3.2).

À l'échelle régionale, la majorité des modèles hydr(géo)logiques ont une capacité limitée pour prendre en compte les processus se développant localement (ex. pompage près de la rivière, effets de stockage dans la zone hyporhéique, transfert des polluants) car ces processus nécessitent une discrétisation fine du domaine d'étude qui peut pénaliser l'efficacité des calculs, et éventuellement l'efficacité numérique du modèle (Saleh, 2010). En outre, des problèmes d'équifinalité (cf. section 2.3.1, p.24), de conditions initiales (Noto et al., 2008), ou de capacité de calcul (Jolly and Rassam, 2009), peuvent survenir quand les modèles régionaux sont utilisés pour simuler les processus locaux ou quand les modèles locaux sont utilisés pour estimer des processus à large échelle (Aral and Gunduz, 2003, 2006; Wondzell et al., 2009). C'est pourquoi des approches alternatives sont nécessaires pour compléter la gamme d'application des modèles (Werner et al., 2006). Toutefois, ni un modèle trop simple, ni un modèle trop complexe ne sont susceptibles d'apporter des réponses fiables (Hill, 2006; Smith et al., 2004; Wondzell et al., 2009). À cela s'ajoute la complexité des échanges nappe-rivière qui peuvent être, pour un même tronçon de rivière, positifs dans certains secteurs et négatifs dans d'autres (Bencala et al., 2011). Tous ces facteurs confirment la nécessité de définir une méthodologie

4. Parmi ces 18 publications, 8 ont été réalisées avec MODCOU ou EauDyssée.

TABLE 3.2: Autres MMD aux échelles intermédiaires et régionales - Compléments à la Tab. 2.2, p.21.

Référence	Surf	Subsurf	Échanges Nappe-rivière	Résolution Numérique	Extension Spatiale	Période Simulée
Bitтели et al. (2010)	Onde diffusive 2D DF	Richards 3D DF	conductance	découplée	3ha	1 an
Dawson (2008)	Navier-Stokes 1D EF	Richards 2D EF	continuité	découplée	section vertivale	30 min
Gunduz and Aral (2005)	Saint-Venant 1D DF	Diffusivité 2D EF	Darcy 2D-latéral	couplée	1 800 km ²	3 mois
Hussein and Schwartz (2003)	Onde Cinématique 1D DF	Diffusivité 3D DF	continuité	découplée	256 km ²	siècle
Kim et al. (2012)	Saint-Venant 2D VF	Diffusivité 3D EF	conductance	découplée	64 km ²	200 h
Liang et al. (2007)	Navier-Stokes 2D	Boussinesq 2D	Darcy 2D-latéral	couplée	8 - 40 ha	2-3 min
Peyrard et al. (2008)	Saint-Venant 2D EF	Boussinesq 2D EF	continuité	couplée	36 km ²	5 ans
Qu and Duffy (2007)	Onde diffusive 2D VF	Richards 2D VF	conductance	couplée	0.2 ha	1 mois
Spanoudaki et al. (2009)	Navier-Stokes 3D DF	Richards 3D DF	conductance	couplée	2.5 ha - 25 km ²	30 h
Shen and Phanikumar (2010)	Onde diffusive 2D VF	Diffusivité pseudo 3D DF	conductance	découplée	12 ha - 1169 km ²	5 h - 7 a
Singh and Bhallamudi (1998)	Saint-Venant 1D DF	Richards 2D DF	continuité	découplée	0.6 m ²	15 min
Yuan et al. (2008)	Navier-Stokes 2D DF	Boussinesq 2D DF	continuité latérale	couplée	160 km ²	30 min

DE : Différences Finies ; EF : Éléments finis mixtes ; VF : Volumes finis
couplée/découplée : le système d'équations numériques est résolu simultanément/séquentiellement

de changement d'échelle afin d'améliorer les simulations des échanges nappe-rivière à l'échelle régionale.

3.2.4 Modélisation des interfaces nappe-rivière : coupler les eaux de surface et souterraines

La simulation des échanges aux interfaces surface/subsurface (Ebel et al., 2009; Kollet and Maxwell, 2006; LaBolle et al., 2003; Furman, 2008), principalement le sol et l'interface nappe-rivière, est réalisée par deux approches distinctes (Tab. 2.2, 3.2 & 3.1), quel que soit le nombre de dimensions de l'espace simulées :

- par un modèle résistif ou de conductance⁵, pour lequel l'interface elle-même a une valeur de conductivité. Le flux d'eau échangé à l'interface est alors calculé comme étant le produit de la conductivité par la différence de charge ou de pression suivant les formulations. Cette approche, qui est la plus répandue, est utilisée par les modèles mécanistes distribués les plus anciens et aussi nombre de récents ;
- par un calcul assurant la continuité du champ de pression et des flux aux interfaces. Ce calcul peut parfois être itératif. Cette approche engendre parfois une discontinuité de la vitesse de l'eau tangentielle au fond de la rivière (Discacciati et al., 2002; Miglio et al., 2003; Urquiza et al., 2008).

Le modèle résistif est le plus utilisé. Des formulations plus ou moins simples de la valeur de la conductance existent pour le cas de la déconnexion entre la rivière et l'aquifère (Osman and Bruen, 2002). Par contre Engeler et al. (2011) indiquent que ce coefficient est dépendant de la température. De plus, des doutes demeurent quant à la validité de la relation du premier ordre en cas de crue à l'échelle régionale lorsque les surfaces d'échange entre la nappe et la rivière augmentent du fait du débordement des rivières dans leurs lits majeurs (Engeler et al., 2011). Irvine et al. (2012) sont aussi favorables au modèle résistif à la condition de bien décrire les hétérogénéités du fond dont la distribution spatiale est difficile à établir (Genereux et al., 2008).

Pour la méthode de couplage par continuité, le calcul de continuité de la pression à l'interface nappe-rivière peut être effectué itérativement ou séquentiellement, l'approche itérative étant supposée plus précise (Sulis et al., 2010). Par contre, la méthode itérative, même si formellement plus esthétique, est beaucoup plus coûteuse en temps de calcul car elle requiert, entre autres, un calcul de convergence numérique entre la pression de subsurface et celle de surface. Afin d'éviter la lourdeur des calculs liés à une approche itérative, de récents développements numériques permettent de résoudre un seul système matriciel couplant les équations de surface et souterraine. Cette approche, dite couplée (Tab. 2.2, 3.2 & 3.1), peut être utilisée quel que soit le modèle d'échange nappe-rivière choisi. En revanche, elle nécessite bien souvent de paralléliser le code de calcul afin de pouvoir simuler un système réel.

D'un point de vue conceptuel, (Delfs et al., 2012; Ebel et al., 2009; Liggett et al., 2012; Nemeth and Solo-Gabriele, 2003) recommandent plutôt l'utilisation du modèle résistif qui permet de mieux comprendre les mécanismes en œuvre, et se révèle, dans le cas de milieux très conducteurs, équivalent au modèle de continuité. De plus, du fait de l'hypothèse, couramment émise, de verticalité des échanges nappe-rivière à l'échelle régionale (Krause et al., 2012; Sophocleous, 2002), le modèle résistif semble être un cadre favorable pour déterminer des lois de changement d'échelle (Boano et al., 2009; Engdahl et al., 2010). Cette hypothèse

5. Il s'agit en fait d'un coefficient d'échange du premier ordre (first order exchange coefficient).

de verticalité des flux ne fait cependant pas l'unanimité puisque [Rushton \(2007\)](#), sur la base d'expériences numériques, indique que le modèle résistif, tel qu'il est mis en œuvre à l'échelle régionale, devrait se baser, pour l'estimation des valeurs de conductance des mailles rivières, sur la valeur de la perméabilité horizontale de l'aquifère et non pas verticale. Il semble cependant possible d'établir une équivalence entre son modèle et le modèle résistif plus classique qui considère la perméabilité verticale en reliant perméabilités verticale et horizontale par un coefficient d'anisotropie.

3.2.5 Stratégie d'étude des interfaces nappe-rivière - Exemple du bassin de la Seine

L'étude des échanges nappe-rivière requiert une approche pluridisciplinaire ([Andersen and Acworth, 2009](#); [Bendjoudi et al., 2002](#); [Sophocleous, 2002](#); [Winter, 1998](#); [Woessner, 2000](#)) et multi-échelle ([Scanlon et al., 2002](#)) afin de limiter les erreurs d'estimation et de valider ces dernières ([Fleckenstein et al., 2010](#)). L'objectif d'un dispositif expérimental d'échantillonnage des échanges nappe-rivière est donc d'être couplé avec des analyses de données et des techniques d'interpolation afin de fournir :

- un modèle tridimensionnel de la structure hydrogéologique d'un système aquifère multicouche
- la géométrie à fine résolution spatiale (idéalement centimétriques) de la structure de la ZH
- des jeux de données spatialement ponctuelles mais temporellement denses sur le long terme permettant de caractériser les écoulements souterrains aux échelles locales et intermédiaires

Ces chroniques distribuées spatialement, interprétées et/ou interpolées ont ensuite pour but de nourrir des modèles à base physique permettant de simuler l'hydrosystème dans sa globalité ainsi que certaines ZH particulières. L'obtention de chroniques à pas de temps fins est fondamentale pour la stratégie adoptée car un pas de temps d'échantillonnage trop lâche peut biaiser la quantification des processus ([de Fouquet, 2012](#)). Ainsi, l'étude des interfaces nappe-rivière nécessite de coupler des stratégies d'échantillonnage multi-échelle, avec des analyses, des interprétations, des interpolations de données spatio-temporelles, et des MMD (Fig. 3.3). L'utilisation de MMD sert de clé de voûte au changement d'échelle entre les échelles locale et intermédiaire, d'une part, et intermédiaire et régionale, d'autre part.

Cette stratégie d'étude des interfaces nappe-rivière est appliquée au bassin de la Seine ([Flipo, 2012](#)). L'analyse de la géologie du bassin montre que de nombreuses plaines alluviales constituent le milieu d'interface entre les nappes et les rivières pour les trois principales formations hydrogéologiques de l'Oligocène, l'Eocène et la Craie du Crétacé respectivement (Fig. 3.4). Ces plaines alluviales sont corrélées avec les zones humides qui recouvrent 6 à 10 % du bassin de la Seine ([AESN, 2006](#)). Cependant, les systèmes alluviaux présentent des types de configurations différentes suivant qu'ils se situent au contact des formations géologiques de l'Oligocène et de l'Eocène ou de la formation de la Craie. Pour aborder les échanges nappe-rivière à l'échelle des formations Oligocène et Eocène, nous nous appuyons sur le continuum hydrologique bassin des Avenelles - Orgeval - Grand Morin - Marne qui a pour objectif de caractériser le fonctionnement hydrologique de systèmes emboîtés depuis les plateaux agricoles jusqu'aux fonds de vallée (cf. section 3.3.3, p.57). Pour ce qui est des échanges nappe-rivière à l'échelle de l'aquifère de la Craie, nous nous appuyerons sur l'étude de la zone humide de la Bassée, et plus largement du réseau hydrographique de la Seine en amont de sa confluence

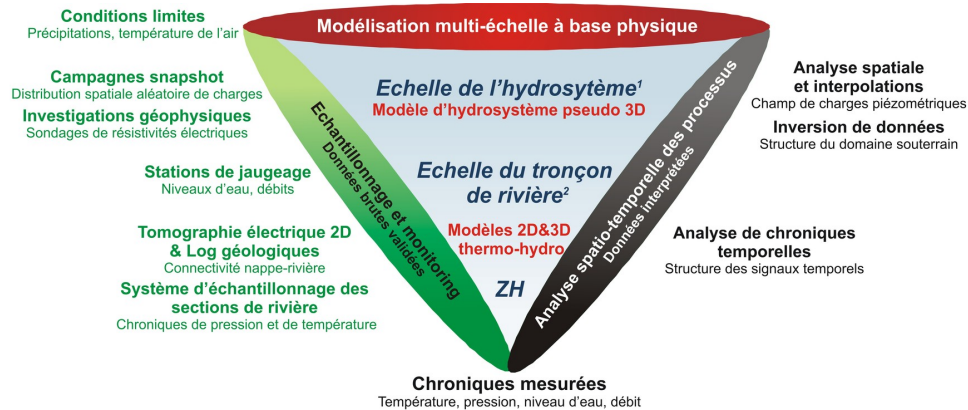


FIGURE 3.3: Stratégie d'étude des échanges nappe-rivière. ^{1,2} Échelles définies par Blöschl and Sivapalan (1995).

avec l'Yonne. Les études locales de ces sites privilégiés seront ensuite mises en contexte global du bassin de la Seine en s'appuyant sur les travaux de modélisation régionale de l'interface nappe-rivière (cf. section 3.4.2, p.61).

Prenant en compte l'échelle clé du corridor fluvial (section 3.2.1, p.45), les actions de recherche ont été structurées autour de deux pôles :

- la conceptualisation et le déploiement d'un dispositif expérimental multi-échelle de quantification des échanges nappe-rivière qui couvre les échelles locale et intermédiaire (section 3.3, p.53) ;
- la prise en compte de l'impact de la phénoménologie haute fréquence des fluctuations des niveaux d'eau en rivière sur la phénoménologie basse fréquence des fluctuations des niveaux piézométriques dans le champ proche de la rivière à l'échelle régionale, qui a nécessité de mettre en œuvre un changement d'échelle depuis l'échelle intermédiaire du tronçon de rivière jusqu'à l'échelle régionale (section 3.4.2, p.61).

3.3 Déploiement d'un dispositif de mesure multi-échelle des interfaces nappe-rivière

3.3.1 Les méthodes d'échantillonnage

De nombreuses méthodes d'échantillonnage des interfaces nappe-rivière existent (Fig 3.5). Pour ce qui concerne la mesure hydrologique représentative des échelles locale et intermédiaire (Andersen and Acworth, 2009; Baxter and Hauer, 2000), on peut citer :

- la mesure d'exfiltration (Lee and Mehta, 1997; Rosenberry, 2008; Rötting et al., 2006)
- l'utilisation d'un réseau piézométrique (Landon et al., 2001; Baxter et al., 2003)
- les essais de pompages (Kalbus et al., 2007; Wang et al., 2011)
- le jaugeage différentiel (McCallum et al., 2012b)
- les bilans hydrologiques et l'analyse des hydrogrammes (Caissie et al., 1996; Mau and Winter, 1996; McCallum et al., 2012a; Pinder et al., 1969).

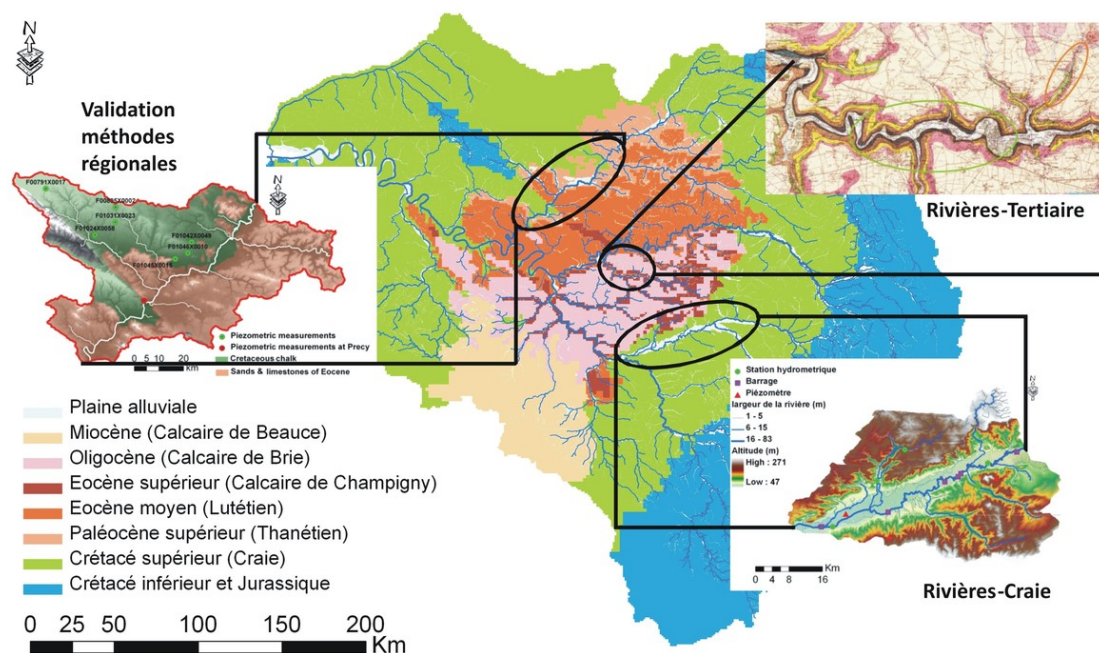


FIGURE 3.4: Description des interfaces nappe-rivière mises en contexte de la structure géologique du Bassin parisien.

Quoiqu'il en soit, les méthodes de traçage à l'aide de traceurs naturels ou artificiels sont les plus populaires (Cox et al., 2007; Gooseff and McGlynn, 2005; Harvey et al., 1996) bien que représentatives d'un seul type d'évènement hydrologique. Par ailleurs les indicateurs biologiques suscitent depuis peu un engouement croissant de la communauté scientifique étudiant les interfaces nappe-rivière (Baxter and Hauer, 2000; Boulton et al., 1998; Boulton, 2007; Claret et al., 1999; Dahm et al., 1998; Hancock et al., 2005; Marmonier et al., 2012; Mermillod-Blondin et al., 2000). Il en va de même pour l'utilisation de la température comme traceur des écoulements (Anderson, 2005; Fleckenstein et al., 2010; Kalbus et al., 2007). En effet l'utilisation de capteurs thermiques discrets s'est rapidement développée au cours des dix dernières années (Anderson, 2005; Anibas et al., 2009, 2011; Conant, 2004; Constantz et al., 2002; Constantz, 2008; Cuthbert et al., 2010; Fanelli and Lautz, 2008; Gordon et al., 2012; Greswell et al., 2009; Hatch et al., 2006; Jensen and Engesgaard, 2011; Kalbus et al., 2007; Kim et al., 2008; Lautz et al., 2010; Lewandowski et al., 2011; Loheide II and Gorelick, 2006; Schmidt et al., 2006, 2007; Westhoff et al., 2011), ainsi que l'utilisation de fibres optiques permettant d'étudier des extensions spatiales plus larges (Briggs et al., 2012; Krause et al., 2012; Lowry et al., 2007; Loheide and Gorelick, 2007; Moffett et al., 2008; Selker et al., 2006; Slater et al., 2010; Vogt et al., 2010b). Certes cette technologie est séduisante, mais elle ne permet pas encore d'aboutir à des estimations quantitatives des échanges nappe-rivière. De même, les indicateurs biologiques constituent une mesure qualitative des échanges intégrés sur un pas de temps au minimum saisonnier. Les capteurs thermiques discrets, quant à eux, offrent une plus grande souplesse d'utilisation et peuvent être raccordés à des boîtiers d'acquisition

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

FIGURE 3.5: Méthodes d'échantillonnage des échanges nappe-rivière. D'après Kalbus et al. (2006) complété par Mouhri et al. (2012b).

de données en continu.

3.3.2 Les échelles spatiales d'échantillonnage

La plupart des méthodes d'échantillonnage des interfaces nappe-rivière vues à la section précédente sont représentatives d'un site local, et ne permettent pas, à elles seules, de quantifier les échanges nappe-rivière le long d'un bief, ce qui requiert des approches pluridisciplinaires (Sophocleous, 2002; Winter, 1998; Woessner, 2000) et multi-échelle (Scanlon et al., 2002) afin de limiter les erreurs d'estimation (Fleckenstein et al., 2010).

Parmi une sélection de 39 publications (Tab. 3.3) traitant de dispositifs de mesure multi-échelle et/ou multi-proxy, Mouhri et al. (2013a) ont identifié que seuls Kikuchi et al. (2012) avaient mis en place un dispositif intégrant les trois échelles d'analyse spatiale (Fig. 3.3). La définition de procédures d'aide à la mise en place de dispositifs expérimentaux intégrant la multi-dimensionalité des problèmes demeure donc un enjeu scientifique d'importance pour les années à venir.

Authors	Spatial scale			Methods													
	HZ	ER [†]	HS [‡]	SM	DG	WLM	PT	WB	TT	TP	TEC	Tδ	TCh	GI	DTS	TI	
Andersen and Acworth (2009)	+	+							+		+						
Angermann et al. (2012)	+	0.25				+			+	+							
Anibas et al. (2011)	+	36.7								+							
Anibas et al. (2012)	+	5.6		+			+			+							
Becker et al. (2004)		40	300		+				+								
Conant (2004)	+	0.06				+	+			+							
Constantz (2008)	+	nd								+							
Cristea and Burges (2009)		86.5							+							+	
Ellis et al. (2007)*		7				+								+			
Faulkner et al. (2012)	+	5				+											
Fleckenstein et al. (2006)		20				+	+										
Gooseff and McGlynn (2005)		0.06									+			+			
Harvey et al. (1996)		0.05				+		+						+			
Hatch et al. (2006)	+	11.5			+	+				+							
Hayashi et al. (2012)		1				+			+		+			+			
Henderson et al. (2009)	+	0.05													+		
Jardani et al. (2012)*		10				+	+										
Kalbus et al. (2006)	+	0.06					+			+							
Keery et al. (2007)	+	1						+		+							
Kikuchi et al. (2012)*	+	21	150	+	+	+	+	+		+	+	+					
Krause and Bronstert (2007)		20	198		+	+		+									
Krause et al. (2007)		0.02				+			+						+		
Landon et al. (2001)		7.1		+		+	+										
Lee (1977)	+			+										+			
Loheide II and Gorelick (2006)	+	2														+	
McCallum et al. (2012b)		33			+									+			
Munz et al. (2011)	+	0.02				+	+										
Nowinski et al. (2012)	+	1				+				+				+			
Nyquist et al. (2008)		0.11									+				+		
Rosenberry and Pitlick (2009)	+	0.3		+								+					
Rötting et al. (2006)*		0.1				+	+										
Schmidt et al. (2006)	+	0.22				+	+			+							
Schuetz and Weiler (2011)		nd							+		+					+	
Sophocleous et al. (1988)		nd	400			+	+										
Vazquez-Sune et al. (2007)		30	200			+		+									
Vogt et al. (2010b)	+	0.2								+					+		
Vogt et al. (2010a)		1					+				+						
Ward et al. (2010)	+	0.07												+	+		
Ward et al. (2012)	+	0.03									+			+	+		

[†] ER : t in km; [‡] HS : Hydrosystem in km²; * multi-layer aquifer system

SM : Seepage meter; DG : differential gauging; WLM : Water Level Measurements; PT : Pumping and/or slug Test

WB : Water Balance; TT : WLM+Temperature TP : Temperature profile; TEC : Electrical Conductivity

T δ : isotope tracer; TCh : Chemical tracer; GI : Geophysical Imaging

DTS : Fiber Optic Distributed Thermal Sensors; TI : Thermal imagery and Thermal infrared imagery

TABLE 3.3: Revues d'études de terrain sur la quantification des échanges nappe-rivière. D'après Mouhri et al. (2013a).

3.3.3 Méthode d'implantation du dispositif du bassin des Avenelles

Le bassin versant des Avenelles est un sous-bassin du bassin de l'Orgeval (Fig. 2.1, p.12) constitué d'un système aquifère multi-couche recouvert par des loess. Le système aquifère est constitué, de la surface vers la profondeur, de l'aquifère de Brie et du Champigny, séparés par une épaisse couche d'argiles vertes et de marnes supragypseuses. Le réseau hydrographique recoupe ces deux formations. Préalablement au déploiement du dispositif d'échantillonnage des échanges nappe-rivière, il faut caractériser les écoulements souterrains régionaux, d'une part, et la structure du bassin ainsi que le contact entre le réseau hydrographique et le bassin, d'autre part. Ces trois tâches ont été réalisées par le biais d'une approche hydrogéophysique couplée à l'utilisation de la géostatistique.

Ainsi les cartes d'erreurs d'estimation de la piézométrie (Fig. 2.3, p.15), obtenues pour les hautes et basses eaux des années 2009 et 2011, ont permis d'identifier trois points d'implantation de piézomètres afin de réduire au maximum l'incertitude d'estimation et donc de mieux contraindre l'estimation des flux convergeant vers le réseau hydrographique (Mouhri et al., 2012a, 2013a).

La structure souterraine du bassin a été définie en utilisant la carte géologique au 1/50 000 couplée à des prospections géophysiques de la morphologie souterraine du bassin (Mouhri et al., 2012a, 2013a). Ces prospections, qui comprennent des sondages TDEM (sondages électromagnétiques dans le domaine temporel), des sondages électriques et des tomographies⁶ de résistivité électrique (ERT), ont permis, sur un transect de 2 km, d'améliorer la description de la géologie de surface et des deux aquifères sous-jacents (formation de Brie et calcaires du Champigny). La présence de logs a permis de valider les inversions des enregistrements de terrain, et ainsi, d'identifier les signatures géophysiques des différentes entités en place. Ces mesures mettent en évidence le contact de la formation de Brie avec les limons de plateau et l'affinement de l'épaisseur jusqu'à la disparition de cette formation en se rapprochant du cours d'eau des Avenelles. Le réseau hydrographique à l'amont du bassin se trouve donc bien en contact avec une formation aquifère composée de la formation de Brie couplée aux limons des plateaux sur une épaisseur d'environ 12 m. Par contre du fait de l'incision de cet aquifère par le réseau hydrographique, ce dernier est en contact avec d'autres formations à l'aval du bassin.

Afin de caractériser la connectivité locale du réseau hydrographique avec l'unité aquifère sous-jacente, des investigations géophysiques et des campagnes de carottage ont été menées. Le choix des sites à prospecter et à instrumenter au niveau des sections de rivière a été fait en deux étapes : la recherche de sections de rivière, puis la détermination de la connectivité. Une reconnaissance sur le terrain a été réalisée en se basant sur l'analyse des cartes géologiques (BRGM et Canipelle (1964)) et sur les observations de la stratigraphie, de la morphologie et de la structure du cours d'eau. Les points ont été identifiés en prenant en compte la géométrie longitudinale de la rivière (linéarité du cours d'eau sur plus de 100 m) et l'accessibilité du point à la mesure géophysique et à l'instrumentation. Six points (sections de rivière) ont été choisis selon différentes connectivités potentielles entre le cours d'eau et le substrat : deux points en amont supposés en connexion avec la formation de Brie, un point intermédiaire en contact avec les argiles vertes où le cours d'eau est probablement déconnecté de l'aquifère, et trois points aval pour identifier le tronçon de rivière en connexion avec le calcaire de Champigny. Les six sites choisis ont fait l'objet de campagnes d'investigation géophysique à l'aide de tomographies de résistivité électrique de 200 m de long perpendiculairement à la

6. panneaux de 200m de côté

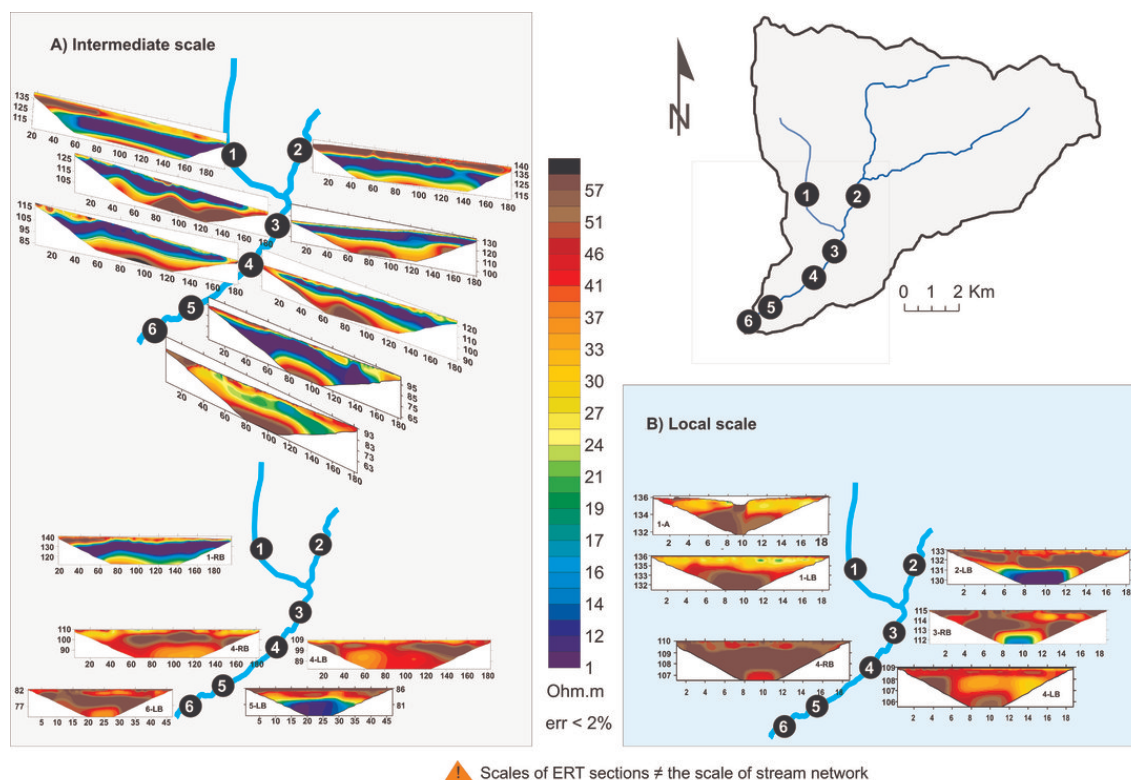


FIGURE 3.6: Caractérisation à l'aide de tomographies de résistivités électriques 2D de l'interface nappe-rivière du bassin des Avenelles aux échelles intermédiaire (panneaux de gauche en haut : profils transversaux, espacement entre électrodes de 4 m ; panneaux de gauche en bas : profils longitudinaux, espacement entre électrodes de 1 m ou 4 m) et locale (panneaux de droite ; espacement entre électrodes de 25 cm). D'après Mouhri et al. (2013a).

rivière. La résolution spatiale associée à l'écartement des électrodes (4m) ne permet pas de distinguer des horizons de puissance inférieure à 2-3m. Afin de préciser la connectivité locale, des tomographies électriques de 19 m de long ont été réalisées avec un pas entre électrodes de 25 cm.

Des forages ont aussi été réalisés dans le but de mettre en place les piézomètres et de valider les profils géophysiques avec des observations de faciès carottés. Ces différentes campagnes ont permis d'établir que les deux sites en amont sont bien connectés à la formation de Brie et des limons des plateaux, drainant respectivement 10,5 et 24 km². Les campagnes de tomographie électriques 2D ont permis de caractériser, à l'échelle intermédiaire, la relation entre le réseau hydrographique et le système aquifère du bassin des Avenelles (Fig. 3.6). Deux points aval (4 et 6, Fig. 3.6) ont ainsi été choisis pour mieux cerner les transferts avec l'aquifère sous-jacent du Champigny (Mouhri et al., 2013a).

Pour chaque section de rivière sélectionnée, un dispositif d'échantillonnage hydrogéophysique de la ZH est mis en place (Fig. 3.7). Il comprend :

- deux piézomètres de bordure équipés par des mini-sondes de température et de pression avec enregistreur à pas de temps 15 min. Des tests de pompage et des essais de traçage

- peuvent être réalisés au niveau de ces piézomètres, pour caractériser les propriétés hydrodynamiques du milieu à l'échelle de chaque section ;
- deux systèmes de mesure de profils verticaux de température et de la pression sur une profondeur de 40-60 cm, avec une discrétisation de 10-20 cm. Un dispositif température-pression est implanté dans la ZH au niveau de chaque rive. La mesure automatique de la température est réalisée grâce aux sondes reliées à des enregistreurs HOBO avec un pas de temps de 15 min et une précision de $1/10$ °C ;
- une sonde enregistre la température et la pression de la colonne d'eau du cours d'eau au pas de temps de 15 min. Grâce à l'établissement d'une courbe de tarage, ces données permettent d'estimer les débits au niveau de chaque section. Elles permettent aussi de calculer les gradients hydrauliques entre la rivière et les piézomètres de bordure.

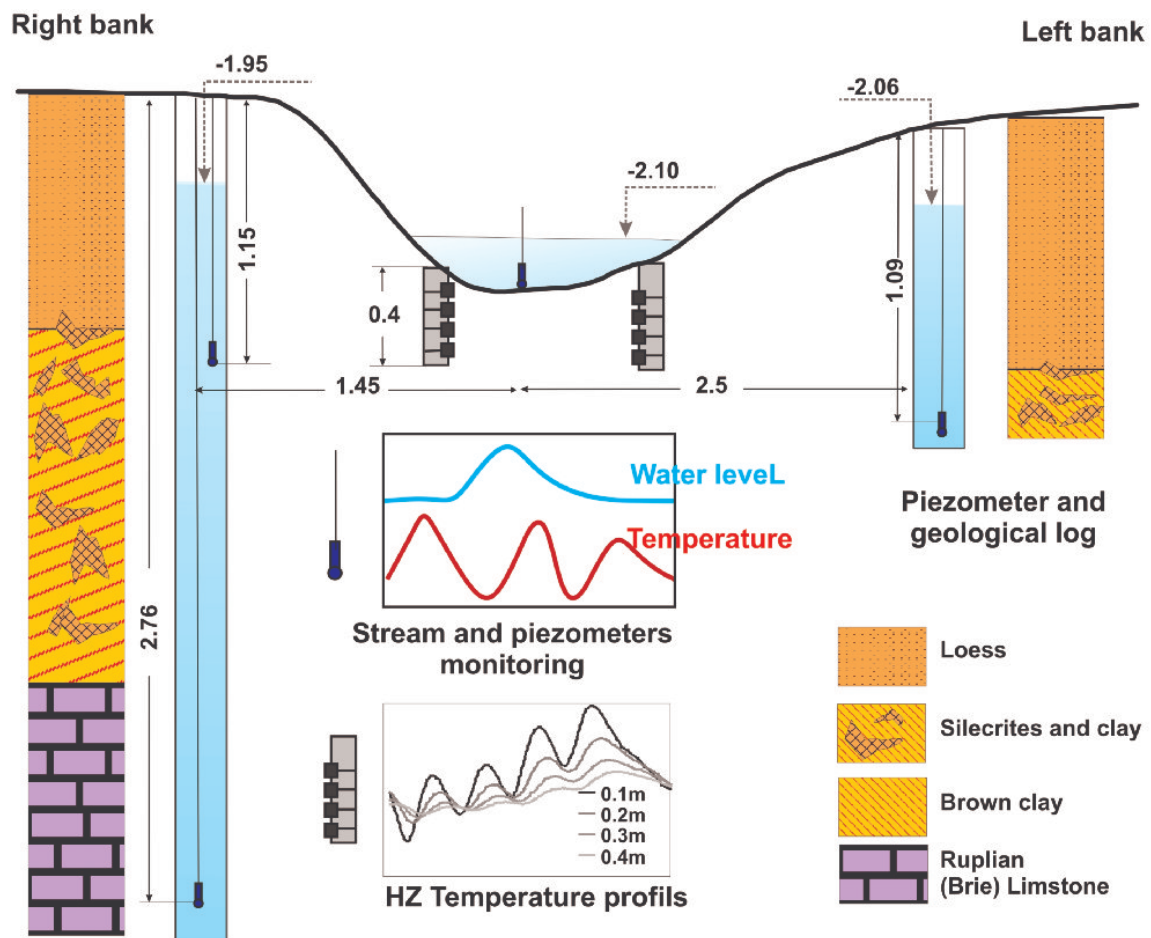


FIGURE 3.7: Dispositif d'échantillonnage des échanges nappe-rivière à l'échelle locale. D'après Mouhri et al. (2013a)

L'interprétation à l'aide du logiciel METIS (Goblet, 2010), résolvant le transport de chaleur en milieu poreux, des premières chroniques de température de la ZH au point amont numéro 1 (Fig 3.6) indique que le dispositif est capable, couplé à un modèle, d'échantillonner des échanges d'eau entre l'aquifère et la rivière (Mouhri et al., 2013a,b).

3.4 Modélisation des interfaces nappe-rivière à l'échelle régionale

Peu de MMD d'hydrosystème ont été appliqués à des bassins de plusieurs dizaines de kilomètres carrés (section 3.2.3, p.49), et, à cette échelle, les interfaces nappe-rivière sont modélisées à l'aide du modèle résistif. Ainsi, ce modèle a été mis en œuvre sur les deux hydrosystèmes de la Loire (Monteil, 2011) et de la Seine (Flipo et al., 2013b; Gomez et al., 2003; Saleh, 2010). Comme l'indique l'équation A.11, p.102, le modèle résistif, appliqué à l'échelle régionale avec des mailles de côté variant de 100 m à 1 km, formule implicitement une hypothèse de verticalité des échanges nappe-rivière. La différence de charges entre l'aquifère et la rivière est alors considérée comme le "moteur" de l'écoulement. Cette approche repose donc sur le fait que les échanges sub-horizontaux via les berges de la rivière sont calculés, à l'échelle de l'aquifère, par le biais de la simulation du champ de charges dans l'aquifère, duquel résulte une charge souterraine "théorique" sous ou au dessus de la rivière. Le gradient de charge entre cette charge souterraine théorique et la charge en rivière définit du point de vue du modèle le "moteur" de l'écoulement (Graillot et al., 2012).

Pour que les échanges soient correctement simulés dans ce cadre théorique, il faut, non seulement calibrer la conductance de l'interface nappe-rivière, mais aussi estimer les niveaux d'eau en rivière. Afin d'estimer les niveaux d'eau en rivière à l'échelle régionale, un MNT⁷ peut permettre de renseigner la cote de drainage des eaux souterraines par la surface au niveau des rivières (Flipo, 2005; Gomez et al., 2003; Thierion et al., 2012), éventuellement enrichie par d'autres informations provenant des services de navigation (Monteil, 2011). Suivant cette procédure, la cote de drainage de la rivière est une condition limite qui ne varie pas au cours du temps. Néanmoins, elle permet au modèle d'estimer spatialement des échanges nappe-rivière à l'échelle d'aquifères régionaux (section 3.4.1, p.60). Le choix peut aussi être fait de simuler les niveaux d'eau en rivière pour chaque maille rivière. Le niveau d'eau en rivière devient alors une variable d'état du modèle et non plus une condition limite. Cependant, la simulation des niveaux d'eau dans un réseau hydrographique de plusieurs milliers de kilomètres est une tâche ardue qui nécessite une puissance de calcul conséquente pour résoudre les équations classiques de l'hydraulique à surface libre, et une quantité d'informations bathymétriques très difficiles à collecter à cette échelle (Saleh, 2010). De plus, si l'utilisation d'un MNT afin de reconstituer ces données bathymétriques permet de bien restituer les débits, il n'en va pas de même pour les niveaux d'eau (Saleh et al., 2013). Une méthode se basant sur l'utilisation de courbes de tarage a donc été développée afin de simuler l'évolution des niveaux d'eau en rivière au court du temps. L'impact de ces fluctuations sur les échanges nappe-rivière est présenté section 3.4.2, p.61 pour le bassin de l'Oise.

3.4.1 Estimation de la contribution des principaux aquifères aux débits d'étiage de la Loire

Après avoir été ajusté, le MMD de l'hydrosystème Loire (section 2.4, p.34), a permis d'établir le bilan hydrologique global du système et notamment les échanges entre les principaux aquifères et les 5 000 km de réseau hydrographique connectés à ces derniers. Appliqué à une problématique de la gestion de la ressource, il a ensuite permis d'estimer la contribution des principaux aquifères au débit d'étiage de la Loire. L'étiage désigne la période de l'année où

7. modèle numérique de terrain

le débit d'un cours d'eau est au plus bas. Cette notion est cependant assez vague car l'étiage peut être une période de l'année, un faible volume d'eau, un faible débit, ou une durée (Abi-Zeid and Bobée, 1999). Il s'agit d'une période critique pour la gestion de la ressource car des usages conflictuels de l'eau peuvent apparaître en cas de saison sèche, caniculaire par exemple. Parmi les différents indicateurs de l'étiage disponibles (Abi-Zeid and Bobée, 1999; Smakhtin, 2001; Galéa and Prudhomme, 1997), le VCN30 a été retenu car il se rapproche du QMNA (débit mensuel minimal annuel) fréquemment utilisé en hydrologie. Le VCN30 est un quantile de débit moyen (ou Volume) Caractéristique sur une durée continue de 30 jours, minimal dans la saison. Il est calculé pour une année donnée comme le débit minimal des débits moyennés par période de 30 jours consécutifs. Pour chaque année simulée, le VCN30 ainsi que la date de début de la période de 30 jours ont été calculés pour chaque maille rivière du modèle. Par contre, seule la période de calcul du VCN30 à Blois a été retenue comme période de référence pour le calcul des échanges nappe-rivière à l'échelle de l'hydrosystème. Ainsi, Monteil (2011) estime que la Beauce est l'aquifère qui contribue majoritairement aux apports à la Loire avec une moyenne de $9.6 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ pour la période 1975-2008. Les apports de la Craie et du Cénomanien sont plus modérés, valant respectivement $4.7 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ et $0.9 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. Ces apports moyens à l'étiage sont légèrement inférieurs à la moyenne annuelle des contributions des aquifères à la Loire ($10.5 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ pour la Beauce, $5.3 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ pour la Craie, et $0.9 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ pour le Cénomanien). Ces estimations sont en accord avec les estimations des apports de l'aquifère de Brie ($10 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$) réalisées sur la période 1982-2003 à l'aide d'un bilan énergétique (Moatar and Gailhard, 2006). Suivant les conditions hydrologiques, ces flux échangés varient d'une année sur l'autre dans une fourchette d'environ 50 % (Monteil, 2011).

L'un des intérêts du modèle distribué est d'estimer la distribution spatiale de ces échanges le long du cours d'eau. Les plus forts apports nets de la Beauce à la Loire ont lieu entre Orléans et Saint-Laurent ($160 \text{ l} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{km}^{-1}$, Fig. 3.8b). Par contre une zone de ré-infiltration des eaux de la Loire vers le domaine souterrain est identifiée entre Dampierre et Orléans (Figure 3.8a), ce qui rend cette zone très sensible à des apports anthropiques en période d'étiage. Cependant la sensibilité du modèle au paramètre d'échange nappe rivière (la conductance) est mal connue. Une simulation a donc été réalisée en multipliant par 10 (un ordre de grandeur) la valeur de ce coefficient (Fig. 3.8b). Les échanges moyens lors de l'étiage sont alors plus contrastés, et les apports nets de la Beauce à la Loire passent de $8.9 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ à $10.1 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ (Monteil, 2011). Ce test préliminaire montre que la valeur de conductance du modèle résistif a un fort impact sur la simulation de la distribution spatiale des échanges dans le champ proche de la rivière, et donc sur la dynamique même de ces échanges. Par exemple sur le bief sensible Dampierre-Orléans, la modification du paramètre d'échange engendre une diminution de l'estimation des échanges nets sur ce bief, avec une intensité d'échange dans les deux sens fortement accrue (Fig. 3.8b). D'autres simulations indiquent aussi que, sous hypothèse de changement climatique, le bilan net des échanges sur ce bief pourrait devenir négatif dans le futur du fait de la diminution des débits d'étiage (Monteil, 2011).

3.4.2 Impact de la fluctuation des niveaux d'eau en rivière sur les échanges nappe-rivière - le bassin de l'Oise

Afin de simuler les échanges nappe-rivière de manière plus fine lors d'événements hydrologiques extrêmes comme les crues, une méthodologie de changement d'échelle de l'échelle intermédiaire vers l'échelle régionale a été développée (Fig. 3.9). Cette méthodologie consiste à mettre en œuvre, à l'échelle intermédiaire, des modèles hydrauliques 1D représentant fine-

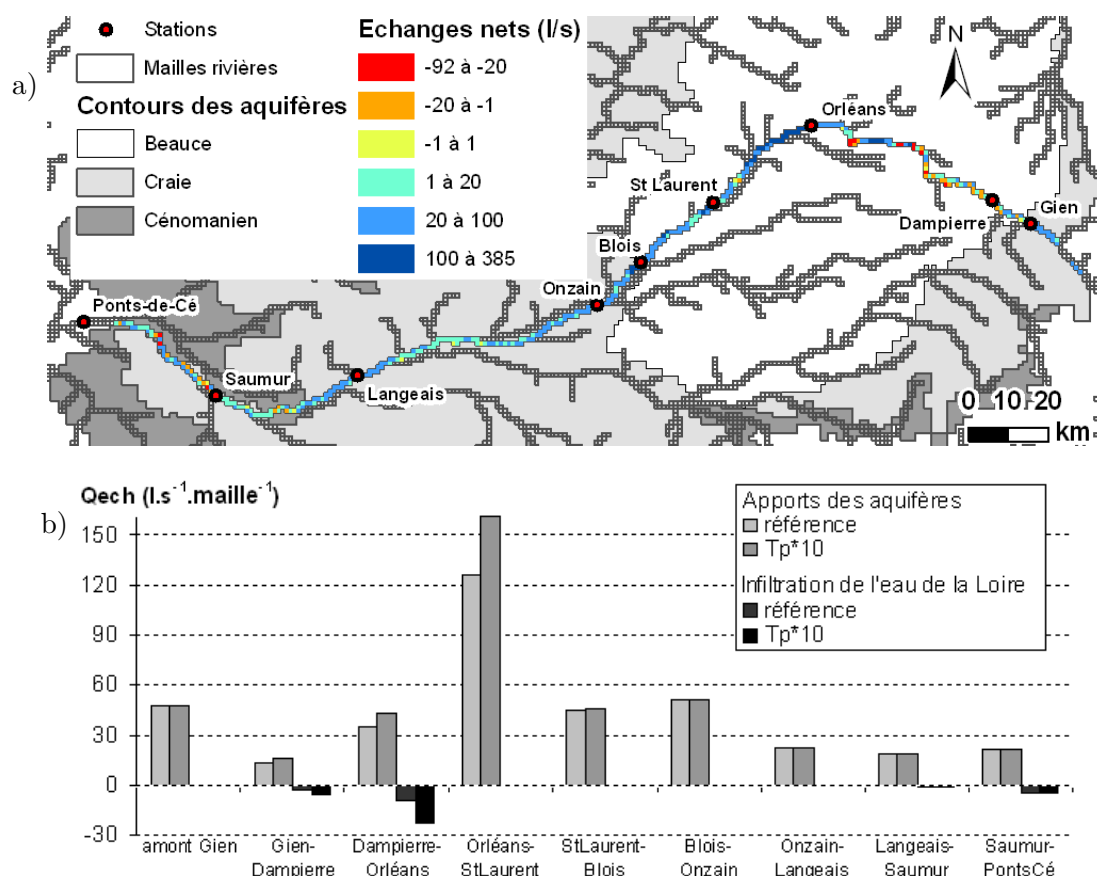


FIGURE 3.8: Estimation des débits moyens annuels échangés entre la Loire et ses aquifères (1975-2009) : a) distribution spatiale des échanges nets entre les aquifères et la Loire, signe positif pour des apports à la Loire, b) impact de la modification de la conductance (T_p) sur la distribution spatiale des échanges nappe-rivière. D'après [Monteil \(2011\)](#).

ment les processus hydrauliques dans la rivière et son lit majeur. Ces modèles sont, dans un premier temps, forcés par les sorties du modèle régional EauDyssée qui simule les apports surfaciques et souterrains⁸ à la rivière pour chaque maille rivière de 1km de côté. Les paramètres du modèle hydraulique distribué sont alors ajustés par rapport à des observations de débit et de niveaux d'eau en rivière. Le modèle ajusté est alors mis en œuvre pour une série de situations hydrologiques contrastées afin de construire une courbe de tarage pour chaque section de rivière⁹. Le modèle hydraulique ayant une résolution spatiale plus fine que le modèle régional, les courbes de tarage sont alors moyennées¹⁰ sur chaque maille rivière de 1 km de côté. Ces courbes de tarage sont les données d'entrée du module QtoZ ([Saleh, 2010](#)), qui permet, à chaque pas de temps de calcul du modèle régional, d'associer à un débit en rivière une cote de l'eau. Cette cote de l'eau constitue alors la valeur prise en compte par le modèle

8. éventuellement une ré-infiltration qui se traduit par un apport négatif

9. Pour un modèle hydraulique 1D résolvant les équations de Saint-Venant, l'unité de simulation est la section de rivière.

10. moyenne pondérée par l'inverse des distances par rapport au centre de la maille rivière

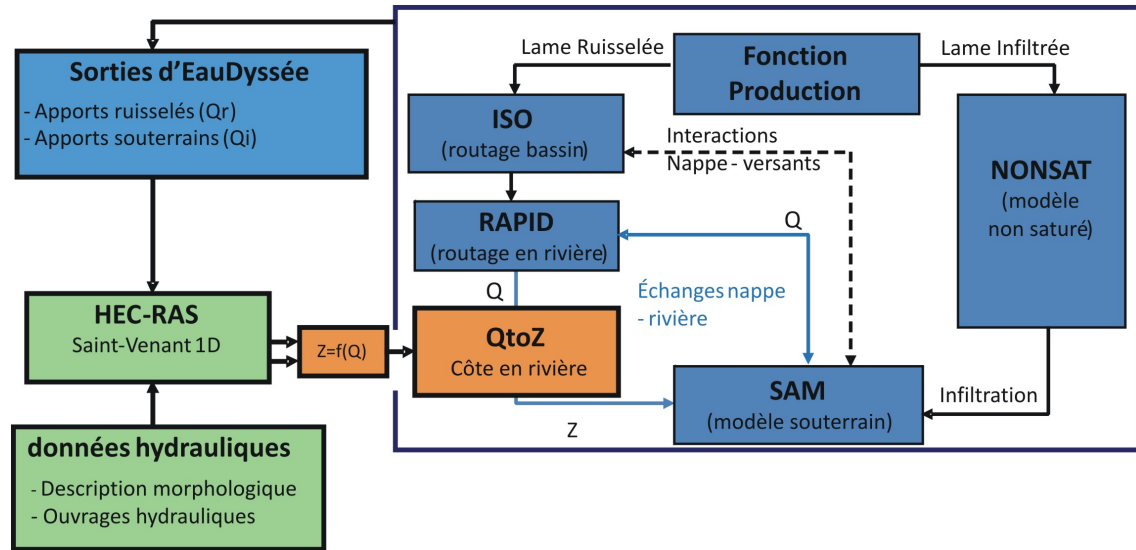


FIGURE 3.9: Méthodologie de Changement d'échelle basée sur l'implémentation de courbes de tarage dans EauDyssée. D'après Saleh et al. (2011).

résistif qui calcule les échanges nappe-rivière en chaque maille rivière du modèle régional.

Cette méthodologie a été appliquée à l'aval du bassin de l'Oise (Saleh et al., 2011) (Annexe D.3, p.160). Ce secteur couvre une superficie de 4 000 km² (Fig. 3.4, p.54). Depuis Sempigny (amont du secteur), l'Oise parcourt 131 km jusqu'à sa confluence avec la Seine. Dans ce secteur, le fonctionnement hydraulique de l'Oise et de ses principaux affluents, l'Aisne et le Thérain, ont été simulés sur 188 km à l'aide du modèle HEC-RAS. Pour 5 ans de simulation, les critères de Nash calculés pour les débits aux trois stations de contrôle varient entre 0.91 et 0.94. Les cotes de l'eau en rivière sont aussi bien décrites, avec des RMSE variant entre 9 et 17 cm sur la même période. Loin d'être fixe, la cote de l'eau fluctue de 5 à 6 mètres en fonction des événements hydrologiques. Ces fluctuations ont un impact significatif sur les fluctuations piézométriques d'un piézomètre (de Précy-sur-Oise) situé à environ deux kilomètres de la rivière (Fig 3.10). La comparaison des fluctuations piézométriques de ce piézomètre avec les fluctuations simulées à l'aide d'un modèle considérant une cote en rivière fixe¹¹, d'une part, et variable (simulée), d'autre part, est instructive. En effet la méthodologie de changement d'échelle mise en œuvre améliore significativement la simulation des niveaux piézométriques dans le champ proche de la rivière. Saleh et al. (2011) ont aussi montré que la prise en compte des fluctuations des niveaux d'eau en rivière avait un impact non négligeable sur la simulation des niveaux piézométriques jusqu'à 20 km autour de la rivière.

Dans de récents travaux, Saleh et al. (2012) ont réalisé des simulations similaires sur une période de 25 ans. Une analyse variographique des variogrammes simples et croisés des piézométries simulées et observées (Fig. 3.11) montre que les fluctuations des niveaux d'eau en rivière explique une part importante de la variabilité piézométrique. L'ajustement du modèle linéaire de co-régionalisation (Annexe B, p.104) permet de décomposer les observations et les simulations en trois canaux (Fig. 3.11 & Tab. 3.4) :

11. méthodologie similaire à celle utilisée section 3.4.1

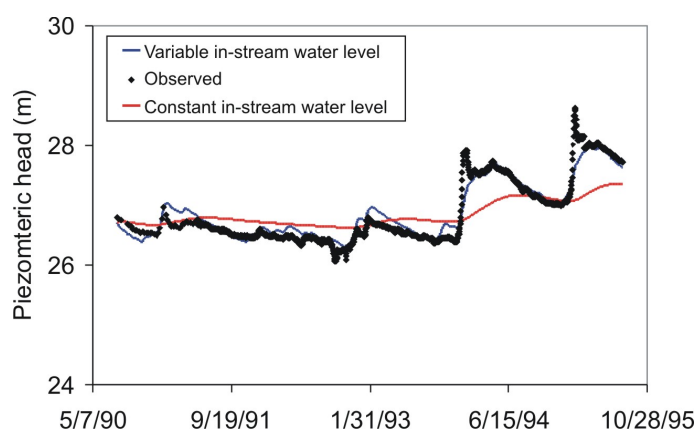


FIGURE 3.10: Fluctuations piézométriques au Piézomètre de Précy-sur-Oise : Observées, simulées avec une cote fixe en rivière, simulées avec une cote variable en rivière. D'après [Saleh et al. \(2011\)](#).

- un canal sphérique de portée 400 jours ;
- un signal périodique de période 6 ans ;
- un signal périodique annuel.

La prise en compte des fluctuations des niveaux d'eau en rivière améliore significativement les simulations. La corrélation globale entre les fluctuations observées et simulées passe de 0.66 pour la simulation à cote fixe à 0.77 pour celle à cote variable. De même, la variabilité des observations est nettement mieux simulée avec le modèle à cote variable. La nature du lien entre les deux signaux est aussi fortement modifiée puisqu'il est assimilable à un modèle linéaire de co-régionalisation pour le cas à cote fixe, et à un modèle à résidus pour le cas à cote variable¹². En analysant plus finement les différents canaux (Tab. 3.4), il apparaît clairement que les fluctuations annuelles observées sont liées aux variations des niveaux d'eau en rivière, et par conséquent au régime hydrologique général de l'année. La simulation à cote fixe s'avère donc incapable de simuler l'impact des crues sur les fluctuations piézométriques du champ proche de la rivière. De manière beaucoup moins intuitive, la simulation du canal périodique à 6 ans est aussi améliorée par la prise en compte des fluctuations des niveaux d'eau en rivière. En effet ces derniers modifient la différence de charge entre l'aquifère et la rivière à chaque pas de temps de calcul. Le MMD est alors plus proche des observations puisque la corrélation entre le canal périodique à 6 ans observé et celui simulé à cote variable est quasiment parfaite alors qu'elle ne valait que 0.94 en utilisant le modèle à cote fixe. Cette amélioration est confirmée par la valeur du rapport des paliers qui se rapproche de l'unité. Finalement il peut être conclu que les différents canaux simulés à l'aide du modèle à cote variable sont nettement mieux synchronisés avec ceux du signal observé.

12. En effet, le variogramme des simulations réalisées avec HEC-RAS est confondu au variogramme croisé, ce qui implique un modèle à résidus ([Rivoirard, 2012](#)).

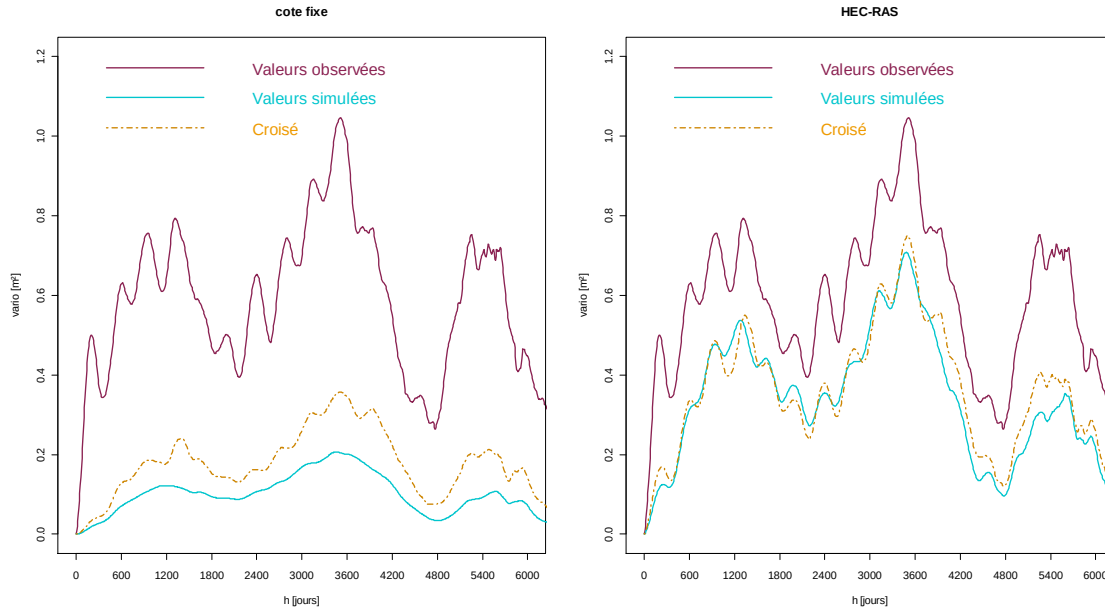


FIGURE 3.11: Variogrammes expérimentaux simples et croisés des simulations et observations des charges piézométriques à Précy sur Oise. À gauche en considérant une charge fixe en rivière ; à droite en simulant explicitement les fluctuations des niveaux d'eau en rivière.

TABLE 3.4: Ajustement du modèle linéaire de co-régionalisation à Précy-sur-Oise pour les piézométries simulées à l'aide d'une approche à cote fixe en rivière, et d'une approche à cote variable (HEC-RAS).

	Sphérique	Cosinus	Cosinus	Total
portée/période [j]	400	2190	365	×
palier obs [m ²]	0.32	0.146	0.109	0.575
palier HEC-RAS [m ²]	0.112	0.184	0.016	0.312
palier croisé HEC [m ²]	0.131	0.163	0.032	0.326
rapport de paliers HEC-RAS	1.690	0.891	2.610	1.358
corrélation HEC-RAS	0.692	0.994	0.766	0.770
palier cote fixe [m ²]	0.03	0.048	0	0.078
palier croisé fixe [m ²]	0.061	0.079	0	0.14
rapport de paliers fixe	3.266	1.744	NA	2.715
corrélation fixe	0.623	0.944	NA	0.661

3.5 Résumé et Conclusion

Un retour sur le concept d'hydrosystème a permis de le structurer explicitement autour de ses interfaces emboîtées. Ce cadre théorique permet alors d'aborder la problématique des échanges nappe-rivière en fonction des échelles d'étude, et d'identifier l'échelle intermédiaire du corridor fluvial comme étant la clé de voûte des emboîtements d'échelles. De plus, ce découpage affiné de l'hydrosystème facilite la réflexion nécessaire à la mise en place de système d'observation multi-échelle du comportement hydrologique des interfaces nappe-rivière. Si les échelles locales et intermédiaires autorisent le déploiement de tels systèmes, une analyse bibliographique approfondie montre qu'il n'en va pas de même de l'échelle régionale, pour laquelle des méthodologies couplant observations et modélisations doivent être développées. Il a été montré que l'utilisation du modèle résistif couplé à une simulation dynamique des niveaux d'eau en rivière permettait de bien simuler les comportements piézométriques à court et moyen termes. Afin de pouvoir avancer dans la compréhension du fonctionnement hydrologique des plaines alluviales à l'échelle régionale, la priorité est de concevoir des réseaux d'observation pertinents à cette échelle, ainsi que de mettre en œuvre des techniques de changement d'échelle, structurées autour de la rivière, qui permettront d'intégrer la compréhension des mécanismes locaux à l'échelle régionale. L'analyse de la géomorphologie des bassins versants semble un outil adapté à la définition d'unités structurelles homogènes, au sein desquelles des lois de passage entre échelles devraient pouvoir être définies. C'est cette approche qui a été choisie pour étudier l'impact des interfaces nappe-rivière sur l'hydrologie du bassin de la Seine.

Chapitre 4

Modélisation de l'impact de l'anthropisation sur la qualité des eaux

Matériel de référence

Ce chapitre s'appuie directement sur [Vilmin et al. \(2012a, 2013b\)](#), [Flipo et al. \(2007c\)](#) (Annexe [D.4](#), p.172), et [Polus et al. \(2011\)](#) (Annexe [D.5](#), p.184). Les travaux de [Even et al. \(2007b\)](#); [Flipo et al. \(2007b,a\)](#); [Polus et al. \(2010\)](#); [Polus-Lefebvre \(2010\)](#); [Vilmin \(2011\)](#); [Vilmin et al. \(2012b, 2013a\)](#) ont aussi servi de support à certaines parties de ce chapitre.

4.1 Typologie des pollutions et modélisation hydro-écologique

L'azote, le phosphore, et la silice sont les trois nutriments majeurs qui contrôlent la production des systèmes aquatiques ([Billen et al., 2007b](#); [Garnier et al., 2010](#); [Neal et al., 2005](#); [Struyf et al., 2009](#)). Depuis le début de l'ère industrielle, les cycles naturels de l'azote et du phosphore ont été totalement modifiés par les activités industrielles et agricoles ([Billen and Garnier, 2000](#); [Billen et al., 2001, 2005, 2007b](#); [Galloway et al., 2004](#); [Garnier et al., 2012](#); [Green et al., 2004](#); [Seitzinger et al., 2010](#)). En comparant les flux générés par des processus naturels aux flux résultants des activités humaines, il apparaît que la part de ces dernières est en constante augmentation ([Billen et al., 2007a](#)) et peut même parfois devenir prépondérante ([Billen et al., 2010](#); [Wagener et al., 2010](#)). Ces perturbations entraînent des modifications significatives de l'environnement avec un enrichissement très important des eaux de surface en éléments nutritifs, qui engendre une eutrophisation de quasiment l'ensemble des systèmes continentaux ([Billen et al., 2005](#); [Boyer et al., 2002](#); [Neal and Heathwaite, 2005](#)), ainsi que des estuaires et des zones côtières ([Billen et al., 1999, 2001](#); [Cugier et al., 2005](#); [Even et al., 2007c](#); [Grizzetti et al., 2012](#); [Kitsiou and Karydis, 2011](#); [Lancelot et al., 2007, 2011](#); [Rabalais et al., 2009](#); [Ragueneau et al., 2002](#); [Thieu et al., 2009, 2010](#)). En effet, l'enrichissement excessif en azote et en phosphore des eaux continentales entraîne un basculement de la limitation par l'azote ou le phosphore à une limitation par la silice en milieu estuarien qui engendre une eutrophisation de la zone côtière ([Billen et al., 1997](#); [Garnier et al., 2000](#)).

Une des conséquences de l'eutrophisation est de modifier les concentrations en oxygène dissous dans l'eau et d'engendrer des périodes où la colonne d'eau est en anoxie. Cette absence d'oxygène a alors des conséquences dramatiques sur la vie piscicole entre autres (Boët et al., 1998).

4.1.1 Pollutions ponctuelles *versus* pollutions diffuses

L'origine de cette perturbation des cycles géochimiques naturels provient d'apports diffus, notamment les intrants agricoles, et ponctuels caractérisés par les rejets de stations d'épurations, industriels ou encore les déversoirs d'orage. S'il est possible de contrôler et réduire rapidement les rejets ponctuels, comme cela a été le cas pour le phosphore (Garnier et al., 2005; Neal et al., 2008, 2012), il n'en va pas de même de la réduction des apports diffus qui relèvent de choix socio-économiques et politiques (Neal and Heathwaite, 2005). Par exemple, la réduction des apports d'engrais nitrates nécessite de revoir complètement le modèle de production agricole et d'assumer les choix sociétaux associés (Billen et al., 2012; de Marsily, 2006; Thieu et al., 2011) en tenant compte des coûts environnementaux (Grote et al., 2005). De plus, les moyens d'action sont difficiles à mettre en œuvre car l'origine de ces pollutions est plurielle (León et al., 2001).

La réduction des apports ponctuels peut être atteinte assez rapidement et produit des effets spectaculaires sur les eaux de surface. Cependant, les sources diffuses ne sont pas taries pour autant et elles peuvent alors continuer à fournir suffisamment de nutriments pour favoriser les blooms algaux (Garnier et al., 2005; Neal et al., 2008, 2012; Némery and Garnier, 2007a,b). Il apparaît donc clairement que la mitigation de la perturbation des cycles des éléments nutritifs majeurs devrait être structurée autour des ordres de grandeur des temps de transfert dans les différents compartiments de l'hydrosystème. La réduction des pollutions ponctuelles obéit à des cinétiques d'aménagement de l'ordre de la dizaine d'années, comme il l'a été constaté pour la réduction des rejets de phosphore. Par contre les pollutions diffusives obéissent à des cinétiques beaucoup plus lentes (Némery and Garnier, 2007a,b), surtout lorsque les aquifères entrent en jeu dans le transfert de ces éléments chimiques (Bouraoui and Grizzetti, 2008, 2011; Darracq et al., 2008; Flipo, 2005; Ledoux et al., 2007; Lindgren et al., 2007). Dans ce dernier cas, il convient, à des fins prédictives, de mettre en œuvre des outils considérant les processus géomorphologiques et hydrologiques pertinents à ces échelles de temps (Rinaldo et al., 2005). De même, la complexité du vivant, organisée en boucles adaptatives à des échelles spatio-temporelles très variées doit être intégrée dans la réflexion (Décamps, 2006). Les changements d'occupation du sol et les évolutions démographiques constituent aussi d'importants moteurs de transformation des sources de pollutions à des échelles de temps intermédiaires (Billen et al., 2007b).

4.1.2 Paradigme d'unicité et de continuité du fonctionnement écologique

Comprendre l'effet de l'anthropisation sur les écosystèmes nécessite de relier les approches globales de celles analysant des écosystèmes de manière isolée. Ainsi, les territoires régionaux peuvent-ils être envisagés comme une mosaïque d'écosystèmes interagissant les uns avec les autres, et dont le fonctionnement dépend aujourd'hui des activités anthropiques (Billen et al., 2007a).

Le River Continuum Concept ¹ (Vannote et al., 1980) a modifié la compréhension du fonc-

1. Le concept de continuum hydrographique

tionnement des réseaux hydrographiques (Billen et al., 2007a,b). L'idée principale inhérente à ce concept est que la structure et la fonction des communautés vivant dans les cours d'eau changent selon un gradient hydrologique et géomorphologique depuis l'amont des réseaux jusqu'aux estuaires des bassins versants. Une des hypothèses fondamentales de ce nouveau paradigme est l'unicité et la continuité du fonctionnement écologique du réseau hydrographique (Billen et al., 1994). Cela a permis d'élaborer des modèles de fonctionnement biogéochimique centré sur les propriétés de chaque individu ou de regroupements d'individus (Roué-Le Gall et al., 2009). Ainsi les propriétés physiologiques et physico-chimiques des espèces peuvent-elles être déterminées indépendamment de leur environnement ; les schémas organisationnels apparaissant dans l'environnement étant contraints par un gradient hydro-bio-géo-physico-chimique. Dès lors, le réseau hydrographique peut être vu comme une série de réacteurs biogéochimiques ouverts, et interconnectés entre eux d'amont en aval, mais aussi avec leur bassin-versant par l'intermédiaire de corridors alluvionnaires, et de zones humides ripariennes (Billen et al., 1994, 2007a). Ce changement de paradigme a alors permis de simuler la croissance phytoplanctonique le long de grands réseaux hydrographiques, comme ceux de la Seine (Billen et al., 1994) ou de la Loire (Descy et al., 2012). Le principe d'unicité des processus autour d'individus, a aussi permis de développer le modèle biogéochimique RIVE (Billen et al., 1994; Garnier et al., 1995) qui est au cœur de la boîte à outils du PIREN SEINE. Le modèle unique n'étant pas un objectif réaliste (Billen et al., 2007a), cette boîte à outils permet de simuler les processus biogéochimiques depuis les têtes de bassin jusqu'aux estuaires inclus (Even et al., 2007a; Poulin et al., 1998).

4.1.3 Modélisation de la qualité de l'eau en rivière

La première modélisation de la qualité de l'eau en rivière a été développée autour de l'oxygène (Streeter and Phelps, 1925) pour mieux comprendre l'effet d'un rejet de matière organique sur la qualité de l'eau en aval. Ensuite, les modèles se sont orientés vers la modélisation du cycle du carbone et des éléments nutritifs associés pour aboutir à la génération actuelle de modèles de qualité de l'eau (Ambrose et al., 1988, 1996; Barnwell et al., 1987; Billen et al., 1994; Brown and Barnwell, 1987; Crabtree et al., 1994; Even et al., 1998; Garnier et al., 1995; Ivanov et al., 1996; Reichert, 1994; Wells, 2000; Wool et al., 2001).

Contrairement au modèle conceptuel de Streeter and Phelps (1925), les processus biogéochimiques sont aujourd'hui simulés à l'aide de modèles déterministes, alors que la simulation de l'hydraulique et du transport peut être basée soit sur des modèles conceptuels, soit sur des modèles déterministes². Ces modèles sont basés sur le principe d'unicité et de continuité évoqué à la section précédente. Ainsi certaines valeurs de paramètres sont mesurées en laboratoire ou *in situ*, puis utilisées pour paramétrer les modèles régionaux (Flipo et al., 2007c; Garnier et al., 1995). Cependant, en biogéochimie, comme en hydrologie, ces modèles souffrent du problème d'équifinalité³. En plus de la complexité hydrologique, ces modèles incluent la complexité biogéochimique, si bien qu'ils sont devenus très difficiles à calibrer et à valider (Arhonditsis and Brett, 2004; Sincock et al., 2003). Une plus grande rigueur dans cette étape est d'ailleurs fortement recommandée par McCuen and Surbeck (2008); Rode et al. (2010) afin que l'utilisation des modèles de modélisation intégrée de la qualité de l'eau puisse demeurer crédible.

2. Voir Arheimer and Olsson (2003); Flipo (2005); Reichert et al. (2001) pour plus de détails sur les différents modèles

3. À ce sujet, voir section 2.3.1, p.24

4.2 Les dynamiques hydro-sédimentaires en rivière

4.2.1 Modélisation de la Seine à l'aide de ProSe

Le modèle PROSe (Annexe C, p.108) couple trois modules permettant de simuler l'hydraulique, le transport et la biogéochimie en rivière. Contrairement à de nombreux modèles de simulation de la qualité des eaux en rivière, qui modélisent la physique des phénomènes à l'aide de modèles conceptuels dont les résultats peuvent mener à des conclusions erronées concernant le fonctionnement biogéochimique des rivières (Darracq and Destouni, 2007), PROSe est un MMD permettant de simuler à pas de temps fin des situations transitoires.

Le secteur simulé s'étend de l'amont de la confluence de la Seine avec la Marne jusqu'à Poses, soit un linéaire d'environ 250 km (Fig 4.1).

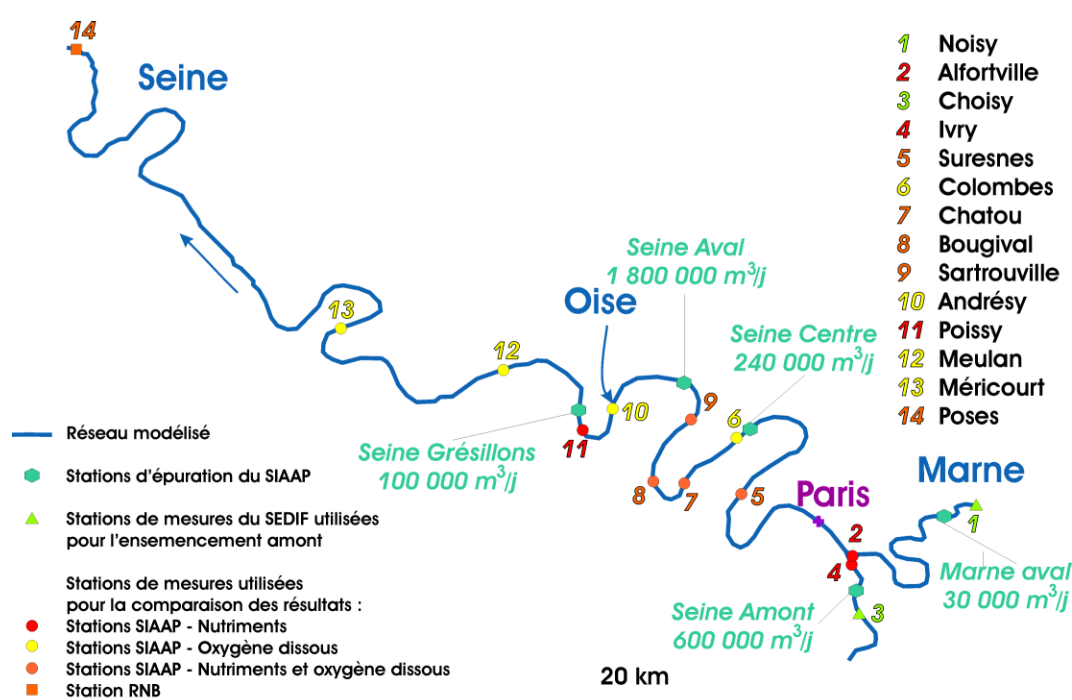


FIGURE 4.1: Localisation sur le linéaire modélisé des principales stations d'épuration et des stations de mesure utilisées pour l'ensemencement à l'amont et pour la comparaison des résultats. D'après Polus et al. (2011); Vilmin et al. (2012b).

Les débits des cours d'eau sont calculés au pas de temps journalier à partir des données de stations hydrométriques.

4.2.2 Mise en cohérence des jeux de données

Pour ensemençer l'amont de la Seine, de la Marne et de l'Oise, des moyennes journalières à Choisy-sur-Seine, Noisy-sur-Marne et Méry-sur-Oise sont utilisées⁴. Pour les petits affluents (Yerres, Mauldre, Epte et Vaucouleurs), les données proviennent du Réseau National de Bassin. Les mesures sont réalisées au pas de temps mensuel. Les concentrations en

4. Données fournies par le SEDIF (Syndicat des Eaux d'Île-de-France).

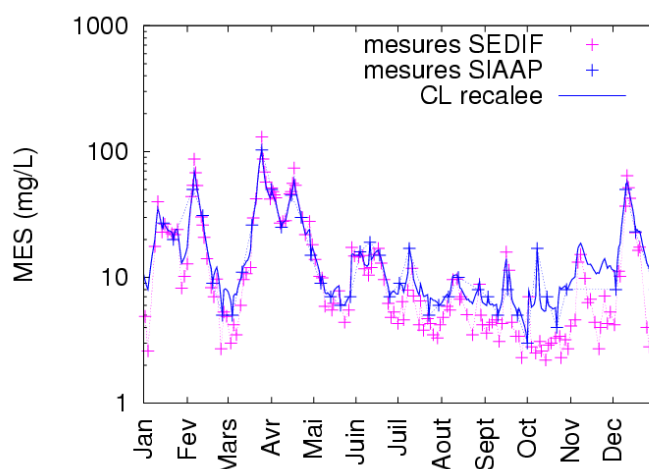


FIGURE 4.2: Co-krigeage de la condition limite amont de matières en suspension à Choisy-sur-Seine en 2008. D'après (Vilmin et al., 2012b).

espèces biogéochimiques présentes dans les rejets sont fournies par le SIAAP⁵ ainsi que par les départements gestionnaires de déversoirs d'orage. Les deux principaux déversoirs de l'agglomération parisienne sont Clichy et La Briche, tous deux situés sur le tronçon entre Suresnes et Colombes. Des programmes de prétraitement sont employés pour transformer toutes ces données biogéochimiques en données utilisables par PROSE. Les résultats de simulation sont systématiquement comparés à des mesures effectuées par le SIAAP (Fig 4.1). Ces mesures sont quart-horaires en ce qui concerne l'oxygène et généralement hebdomadaires pour les autres indicateurs.

Les jeux de données utilisés pour forcer et valider le modèle PROSE ont des origines variées et les organismes producteurs de données (SEDIF et SIAAP) ne suivent pas les mêmes protocoles de mesure. Dans le cas des nitrates pour la Seine, la chronique mesurée à l'amont présente des concentrations systématiquement supérieures à la chronique mesurée quelques kilomètres en aval par un autre organisme (Polus et al., 2011). Même si les concentrations ne sont pas les mêmes, les deux chroniques sont bien corrélées (coefficient de corrélation de 0.94). L'écart entre les deux chroniques ne peut être expliqué par un processus biogéochimique. Cela pose alors un problème pour l'ajustement des paramètres. Afin de minimiser la propagation des erreurs dans le modèle, une méthodologie basée sur l'utilisation du co-krigeage a été proposée par (Polus-Lefebvre, 2010; Polus et al., 2011). Cette méthode permet de reconstituer une chronique amont passant par les valeurs mesurées à la station de contrôle avec la variabilité de la chronique mesurée en amont. Cette méthode permet d'homogénéiser le jeu de données, tout en conservant l'information contenue dans la chronique mesurée⁶. Elle permet aussi de limiter les erreurs de modélisation, mais n'est utilisable que lorsque les deux chroniques mesurées sont bien corrélées. Ainsi, Vilmin et al. (2012b, 2013a) ont-ils pu estimer les concentrations amont de matières en suspension (Fig. 4.2), mais pas les concentrations en orthophosphates qui ne présentaient pas de corrélation.

5. Syndicat Intercommunal d'Assainissement de l'Agglomération Parisienne

6. La variabilité de la chronique présentant le plus de mesures est conservée

4.2.3 Calibration des processus hydro-sédimentaires

Une nouvelle calibration des processus d'érosion et de sédimentation, tels que simulés par PROSE (section C.4.2.1, p.123) a été réalisée par Vilmin (2011); Vilmin et al. (2012b) pour les années 2007 et 2008, puis étendue à une période de 5 ans de 2007 à 2011 en scindant la période de calcul des fonctions objectif en fonction de l'hydrologie (Vilmin et al., 2013b). Les périodes d'étiage servent à calibrer le coefficient d'érosion lié à la navigation, et les périodes de hautes eaux celui lié au maintien des particules en suspension par dissipation d'une partie de l'énergie turbulente (voir section C.4.2.1, Annexe C, p. 123 pour plus d'informations à ce sujet). Vilmin (2011) a estimé que le doublement de la puissance érosive de navigation, et que la multiplication par quatre de la puissance érosive de l'écoulement, permettait de mieux reproduire les concentrations en MES dans la colonne d'eau.

La meilleure simulation a été sélectionnée sur la base du biais et de la RMSE calculée sur l'ensemble des six stations du SIAAP (Ivry, Suresnes, Chatou, Bougival, Sartrouville et Poissy). Afin de discriminer la part de la navigation de celle de l'érosion due à la puissance de l'écoulement, ces critères ont été calculés pour toute l'année 2008, ainsi que pour la période du 15 mai 2008 au 15 novembre 2008 seule (Figure 4.3). Entre le 15 mai et le 15 novembre 2008, aucun pic de turbidité n'apparaît. En l'absence d'événements hydrologiques extrêmes, seule la navigation permet de remettre les particules en suspension. La période d'étiage 2008 permet donc de calibrer le coefficient lié à la navigation.

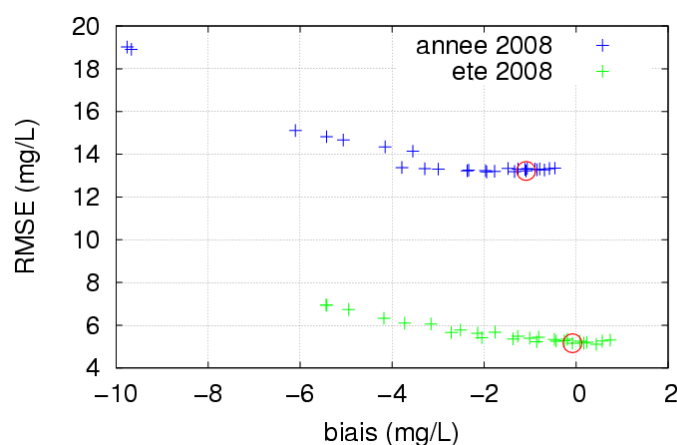


FIGURE 4.3: Biais et RMSE sur des concentrations en MES simulées en 2008 sur l'ensemble des stations SIAAP. Les cercles rouges correspondent aux critères statistiques de la simulation sélectionnée. D'après Vilmin et al. (2012b).

Finalement, le nouveau paramétrage permet d'améliorer significativement les performances du modèle. Les niveaux de base de concentration en MES, lors des périodes de faible débit, sont bien reproduits et les pics simulés en hiver sont plus proches des pics mesurés. Le biais sur les concentrations en MES des 6 stations SIAAP sur l'ensemble de l'année 2008 passe de -9,76 à -1,09 mg/L, et il passe de -5,42 à -0,08 mg/L sur la période de faibles débits. La RMSE est quant-à-elle réduite d'environ 5 mg/L sur l'ensemble de l'année 2008. Ces nouveaux paramètres ont ensuite été validés pour les années de 2007 à 2011 (Vilmin et al., 2012b, 2013b).

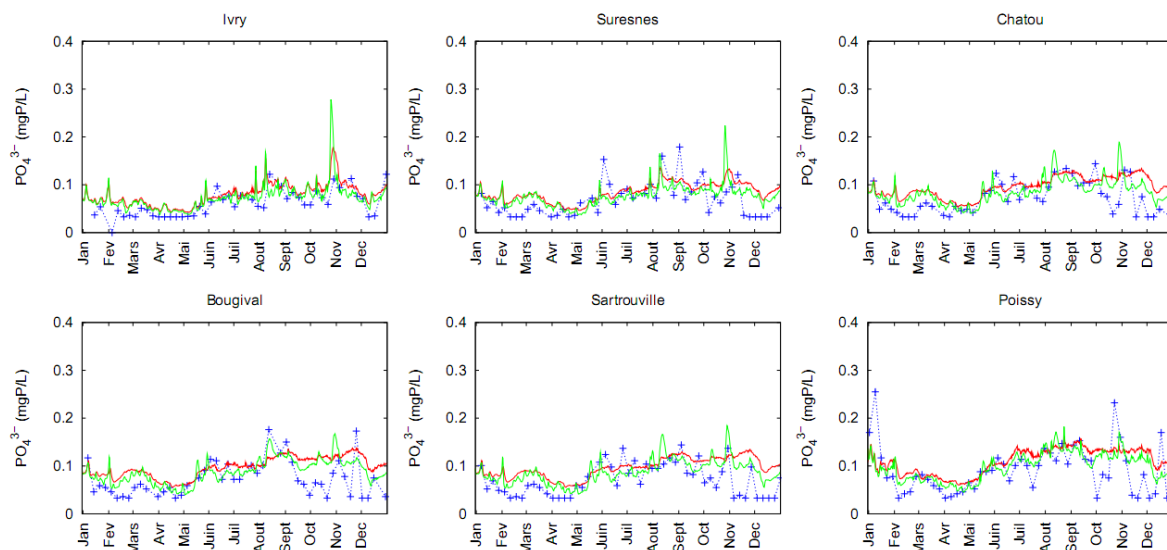


FIGURE 4.4: Concentrations en orthophosphates mesurées (croix bleues) et simulées en 2008 avec adsorption, avant (ligne rouge) et après (ligne verte) calage de l'érosion. D'après [Vilmin et al. \(2012b\)](#)

4.2.4 L'adsorption du phosphore

Comme il a été vu précédemment, les apports diffus de phosphore constituent une source importante de phosphore pour la Seine (entre 20 et 25 %), dont l'origine provient essentiellement du ruissellement sur les terres agricoles ([Némery and Garnier, 2007a](#)). Chaque année, la Seine exporte plusieurs milliers de tonnes de phosphore vers son estuaire, dont environ la moitié est comptabilisée sous forme de phosphore particulaire ([Némery and Garnier, 2007a](#)). Cet élément nutritif est extrêmement réactif en termes d'échanges entre la phase dissoute et la phase particulaire, via le processus d'adsorption/desorption ([Calvet, 1989](#)). Dans la continuité des travaux portant sur la simulation des processus sédimentaires (section 4.2.3, p.73), l'impact de ce processus sur les transferts de phosphore en Seine a donc été étudié par ([Vilmin et al., 2012a, 2013b](#)) pour les 250 km de Seine simulés avec PROSE (Fig. 4.1) pour les années 2007 et 2008.

Tout d'abord le processus d'adsorption/desorption a été implémenté dans le logiciel PROSE (cf. section C.3.6, p.118). Le calage des processus sédimentaires couplé à l'implémentation d'une loi fonctionnelle d'adsorption/désorption ([Billen et al., 2007a](#)) améliore significativement la simulation des concentrations en orthophosphates dans la colonne d'eau. La variabilité des concentrations simulées est augmentée et se rapproche alors de celle des mesures (Fig. 4.4). Le biais global sur l'ensemble des six stations SIAAP passe de 0,025 à 0,017 mgP/L pour l'année 2007, et de 0,025 à 0,014 mgP/L pour l'année 2008.

De plus, [Vilmin et al. \(2013b\)](#) indiquent que le calage permet d'améliorer significativement les concentrations en orthophosphates dans la colonne d'eau, essentiellement en période de hautes eaux. Une analyse variographique sur la période 2007-2011 montre aussi que le modèle simule beaucoup mieux les variabilités temporelles des concentrations en orthophosphates après calage de l'érosion, surtout la variabilité annuelle qui était quasiment inexistante avant calage.

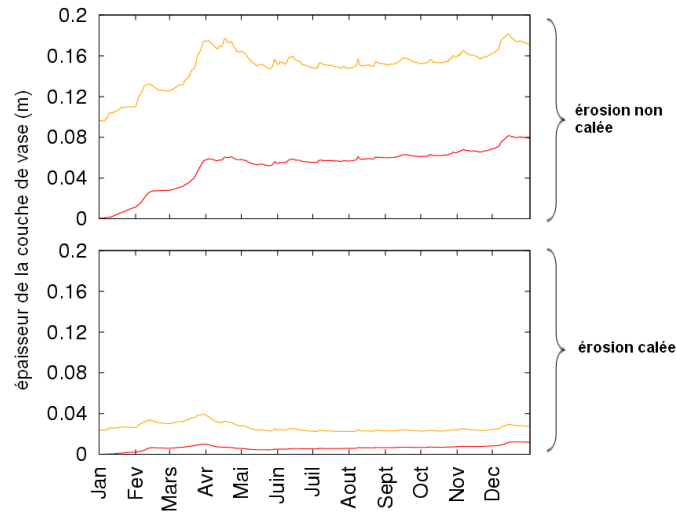


FIGURE 4.5: Evolution de l'épaisseur de vase moyenne simulée sur l'année 2008 avec une couche de vase initiale nulle (rouge) ou égale à la couche de vase calculée par PROSE fin 2007 (jaune), avant et après calage de l'érosion. D'après (Vilmin et al., 2012b).

4.2.5 La complexité des processus benthiques

Les processus benthiques sont des processus qui ont lieu au fond de la rivière. En faisant fi de la zone hyporhéique, ils ont principalement lieu dans les vases de fond pour les grandes rivières naviguées dont la Seine fait partie.

4.2.5.1 Accumulation des vases

Les nombreux barrages qui barrent le cours de la Seine perturbent les dynamiques sédimentaires et génèrent des accumulations de vases. Une comparaison des accumulations de vase simulées par le modèle avec deux jeux de paramètres et deux états initiaux distincts a été réalisée pour l'année 2008. Les jeux de paramètres hydro-sédimentaires sont ceux avant et après re-calibration (cf. section précédente). Les deux états initiaux correspondent à un stock de vase nul en début d'année et au stock de vase simulé à la fin de l'année 2007. La modification des paramètres d'érosion a un impact significatif sur l'accumulation des vases (Fig. 4.5).

Le modèle simule, en utilisant le jeu de paramètres avant re-calibration, une accumulation de vase spectaculaire tout au long de la Seine, quel que soit l'état initial (environ 8 cm.an^{-1} en moyenne). Cette accumulation semble peu réaliste compte tenu du fait que la Seine est loin d'être un fleuve en cours d'envasement. Cette accumulation est réduite à 1 à 2 cm.an^{-1} en moyenne pour une simulation utilisant les paramètres hydro-sédimentaires re-calibrés. Le calage des paramètres semble donc permettre d'éviter les dérives en termes d'accumulation de vase dans le cas de simulations longues.

Si les simulations réalisées indiquent que l'accumulation de vase semblait sur-estimée précédemment par PROSE, l'impact de l'état initial sur l'estimation de la quantité de vase accumulée au cours d'une année reste flou, et l'hypothèse d'un stock de vase nul en début de simulation discutable.

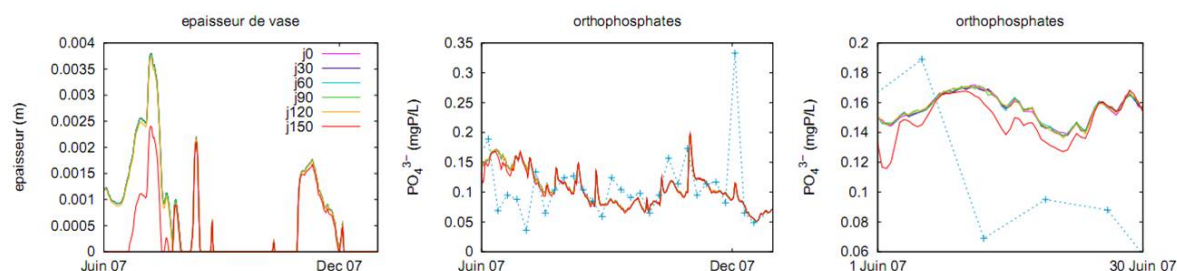


FIGURE 4.6: Epaisseurs de vase et concentrations en orthophosphates simulées à Suresnes entre le 1^{er} et le 30 juin 2007. D'après Vilmin et al. (2012b).

4.2.5.2 Masse critique de sédiments

La simulation des stocks de vase est peu robuste et présente une forte dépendance aux conditions initiales (Fig. 4.5). La question se pose alors de savoir dans quelle mesure une erreur d'estimation de ce stock peut se propager dans la simulation des concentrations de la colonne d'eau. Pour répondre à cette question, Vilmin et al. (2012b) ont réalisé une série de simulations avec différents stocks initiaux de vase. La première simulation débute le 1^{er} janvier 2007, appelé par la suite «jour 0» et se termine le 31 décembre 2008. 12 autres simulations ont été réalisées avec comme état initial une couche de vase d'épaisseur nulle. Elles commencent aux jours 15, 30, 45, 60, 75, 90, 105, 120, 365 et 515 et se terminent toutes le 31 décembre 2008. Plus la simulation démarre tôt et plus l'épaisseur de vase accumulée en fin de simulation est importante. L'épaisseur de vase accumulée en fond de rivière est donc différente pour chacune des simulations, ce qui permet d'étudier l'impact de l'accumulation de vase sur les concentrations et flux d'espèces dissoutes.

L'impact sur les concentrations en éléments dissous dans la colonne d'eau est faible à l'échelle d'une simulation annuelle (le biais par rapport aux concentrations simulées en démarrant au jour 0 est inférieur à 1 % sur l'ensemble de l'année pour toutes les espèces dissoutes considérées, Fig. 4.6). Par contre, sur une période de 30 jours le biais entre les résultats d'une simulation commençant au début de la période considérée et une simulation commençant 150 jours plus tôt est inférieur à 5 %. Le biais est plus significatif (entre 5 et 10 %) pour les orthophosphates et l'ammonium dont la concentration dans la colonne d'eau est plus faible dans le cas d'une couche de vase en cours de formation (simulation démarrant au début de la période considérée). Ces écarts semblent liés à la minéralisation de la matière organique dans les sédiments. De plus, la concentration en oxygène dissous dans la colonne d'eau est légèrement plus faible pour la simulation présentant un stock de vase initial, qui favorise la minéralisation de la matière organique. Ainsi, le calage de l'érosion entraîne une réduction des flux de minéralisation de la matière organique dans les vases, ce qui a pour conséquence de réduire :

- le pompage benthique de l'oxygène dissous de la colonne d'eau ;
- le relargage d'éléments nutritifs (orthophosphates et ammonium) vers la colonne d'eau.

Finalement l'amélioration de la simulation de la dynamique des sédiments entraîne une amélioration globale de la simulation des concentrations en carbone, azote et phosphore dans la colonne d'eau (Vilmin et al., 2013b).

L'analyse des tests de la rémanence de l'état initial sur les simulations montre qu'il existe une valeur seuil d'épaisseur (ou masse critique) de vase au-dessus de laquelle l'épaississement

de la couche de vase n'a plus d'effet sur les concentrations calculées dans la colonne d'eau. Cette valeur seuil semble correspondre, d'après les résultats des simulations réalisées, à l'épaisseur de vase accumulée en 30 jours d'étiage. En effet, pour la simulation débutant début juin 2007, les concentrations en orthophosphates de la colonne d'eau, simulées à la fin du mois de juin 2007, sont quasiment égales à celles calculées par des simulations débutant plus tôt (Fig. 4.6).

La spatialisation de ces dépôts a un impact local⁷ sur la qualité de l'eau. En effet, la dynamique hydro-sédimentaire joue un rôle important dans le cycle de l'oxygène lors d'événements pluvieux en période d'étiage (Even et al., 2004, 2007b). Ainsi, PROSE simule-t'il une forte sédimentation de la matière organique des déversements d'orage. Ces dépôts sédimentaires engendrent une rémanence de ces pollutions ponctuelles qui se comportent comme des pompes à oxygène. Even et al. (2007b) ont montré que la présence de ces dépôts engendrait une forte chute de l'oxygène en période d'étiage pour l'année 1996. La comparaison d'une simulation tenant compte des déversements d'orage avec une autre n'en tenant pas compte montre que le pompage benthique de l'oxygène par ces dépôts est important, et qu'il peut atteindre $5 \text{ mgO}_2 \cdot \text{L}^{-1}$ en période critique (Voir Fig. 4 dans Even et al. (2007b)). D'après les simulations de Even et al. (2007b), ces dépôts auraient un impact sur la colonne d'eau pendant une quinzaine de jours, ce qui est en accord avec les tests précédents. Il convient cependant de pondérer ces résultats par le fait qu'il ne s'agit pas d'observations, mais de simulations qui peuvent être biaisées par l'hypothèse d'homogénéité de la couche de vase. L'effet de la stratification chimique des couches de sédiments n'est pas encore simulé par PROSE.

4.3 Le cycle de l'azote

Les nitrates sont un des éléments nutritifs qui favorisent l'eutrophisation (Garnier et al., 1995; Jarvie et al., 2005). Dans la plupart des régions du monde leur concentration excède les seuils de potabilité⁸ (Almasri, 2007; Billen et al., 1999, 2001, 2005; Cinnirella et al., 2005; de Wit and Bendoricchio, 2001; Garnier et al., 2005; Fazal et al., 2005; Jarvie et al., 2005; Lasserre et al., 1999; McLay et al., 2001; Vinten and Dunn, 2001) surtout dans les régions d'agriculture intensive (Hudak, 2000; Spalding and Exner, 1993). Des bilans d'azote, réalisés pour de grands bassins versants d'Amérique du Nord et d'Europe, montrent qu'une part significative des intrants agricoles est éliminée du bassin lors de son transfert au sein de ce dernier (Billen et al., 1999; Billen and Garnier, 2000; Billen et al., 2001, 2005, 2007b, 2009; Boyer et al., 2002; Grizzetti et al., 2008; Howarth et al., 1996; Seitzinger et al., 2002; Van Breemen et al., 2002; Wade et al., 2001; Wriedt, 2004; Wriedt et al., 2005).

Les interfaces nappe-rivière semblent jouer un rôle prépondérant dans l'élimination des nitrates pour les secteurs amont des grands bassins versants (Montreuil et al., 2010; Teissier et al., 1999; Vanrolleghem et al., 2001). Par contre, les processus pélagiques deviennent prépondérants en se déplaçant vers l'aval (Rode et al., 2010; Vanrolleghem et al., 2001), et le rôle épuratoire des interfaces nappe-rivière semblent aussi y diminuer (Curie et al., 2011). L'analyse des transferts de nitrates distinguera donc les processus de transfert amont avec une nette prédominance des interfaces nappe-rivière dans le contrôle des flux de nitrates, des processus de transfert aval où la colonne d'eau est le réacteur biogéochimique principal.

7. local est employé ici pour les dimensions spatiales et temporelles.

8. $50 \text{ mgNO}_3 \cdot \text{L}^{-1}$ En Europe

4.3.1 Quantification de l'élimination de l'azote dans les bassins amont

Afin de préciser ces estimations globales et d'analyser les processus ayant cours sur un bassin versant en contexte de bassin sédimentaire, la plate-forme de modélisation CAWAQS (CATCHMENT WATER QUALITY SIMULATOR) a été développée (Flipo, 2005). CAWAQS a été appliqué au bassin du Grand Morin (Flipo et al., 2007b,c) en portant une attention particulière à la calibration et à la validation du transfert en aquifères (Flipo et al., 2007b), qui est une partie très souvent négligée par les modèles de transfert de nitrates, ce qui mène à des conclusions erronées (Beaujouan et al., 2001; Darracq and Destouni, 2007; Ferrant et al., 2011) du fait des temps de transfert très longs dans ce compartiment de l'hydrosystème (Bouraoui and Grizzetti, 2008, 2011; Darracq et al., 2008; Flipo, 2005; Ledoux et al., 2007; Lindgren et al., 2007). CAWAQS correspond globalement au couplage de EauDyssée (Annexe A, p.96) et PROSE (Annexe C, p.108) qui remplace le module de transfert en rivière simplifié.

4.3.1.1 Exemple du Grand Morin

Le bassin versant du Grand Morin, d'une superficie de 1200 km², appartient au plateau Briard. Les limites d'un bassin versant surfacique ne sont pas les mêmes que celles du bassin versant souterrain. Dans le cadre d'une modélisation couplée surface-souterrain, ce sont les conditions limites hydrogéologiques qui fixent l'extension du domaine. Pour le Grand Morin, les limites hydrogéologiques sont : la Marne, le Petit Morin, l'Yerre, et la cuesta d'Ile de France⁹ (Fig. 4.7).

La structure multicouches des aquifères tertiaires du Grand Morin est assez complexe (Flipo, 2005). Deux regroupements d'aquifères ont été considérés : l'Oligocène et l'Eocène. L'Oligocène décrit les petits aquifères de surface (essentiellement la nappe de Brie) jusqu'aux marnes vertes et marnes supragypseuses. L'Eocène englobe les nappes du Soissonnais et de Champigny. Sur le bassin de la Seine, il a été admis que les argiles et sables de Beauchamp, qui séparent les deux unités de l'Eocène, et dont l'épaisseur varie de 1 à 30 m (AESN, 1974), ne constituaient pas une barrière hydraulique efficace à l'échelle régionale compte tenu des discontinuités de sédimentation observées. On admet que cette hypothèse est vérifiée sur le bassin du Grand Morin. On peut donc considérer que la formation Eocène, constitue un ensemble assez homogène, que l'on peut modéliser par une seule couche.

Une analyse de la structure géologique du bassin montre que (Flipo, 2005) :

1. l'Oligocène, d'une épaisseur moyenne de 8.6 m, est d'un ordre de grandeur moins épais que l'Eocène, d'une épaisseur moyenne de 83 m ;
2. l'épaisseur de la couche Eocène croît d'un ordre de grandeur d'est en ouest (de 15 à 100 m) ;
3. l'épaisseur de l'aquitard qui sépare les deux formations est quasiment nulle à l'est, alors qu'elle peut atteindre 35 mètres au nord-ouest (secteur de l'Orgeval).

La partie hydrologique du modèle a été calibrée sur une période de 10 années et validée sur une période de 5 ans (Flipo et al., 2005). Les concentrations en nitrates dans l'Eocène ont été interpolées pour chaque année de 1977 à 1988 à l'aide de la géostatistique. Les flux de nitrates percolant jusqu'au toit de l'aquifère ont été estimés sur cette même période à l'aide du modèle STICS (Brisson et al., 1998). Ce flux est de 3 330 kgN.km⁻².an⁻¹ (Flipo

9. La cuesta d'Ile de France marque, à l'Est du bassin du Grand Morin, le passage brusque des formations tertiaires à la craie du Secondaire.

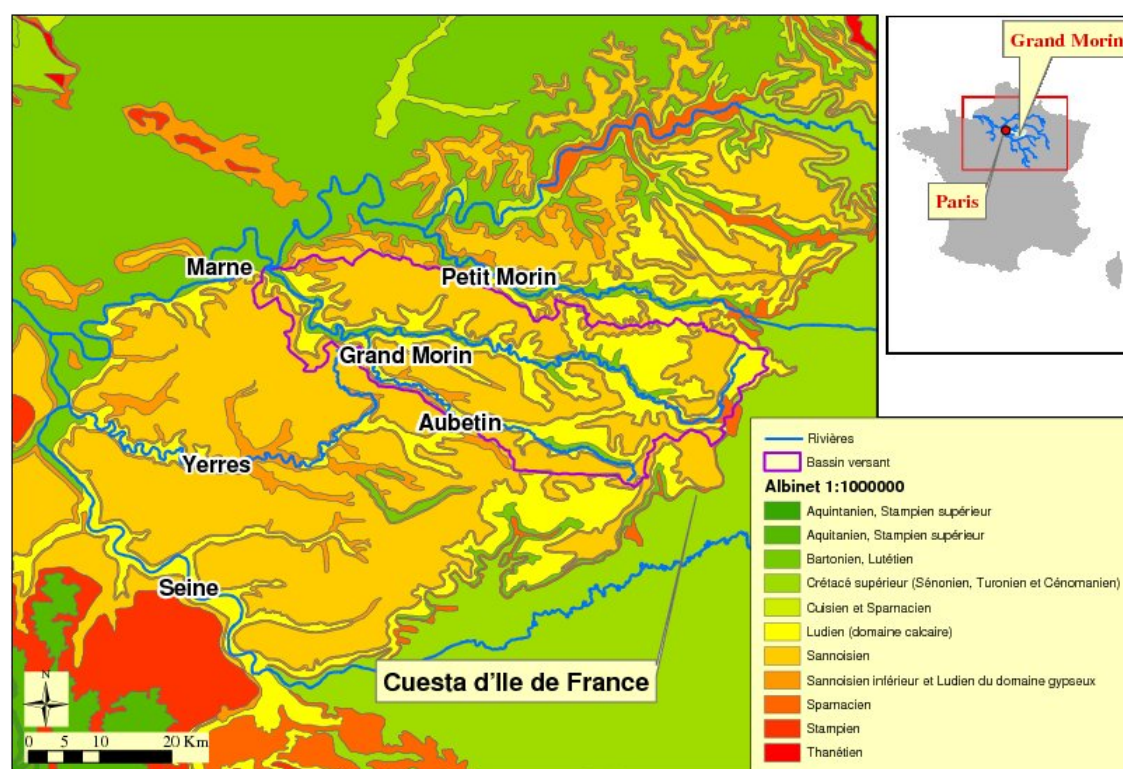


FIGURE 4.7: Le Grand Morin dans son contexte géologique. D'après Flipo et al. (2007c)

et al., 2007b). Ces flux encadrent le flux moyen d'infiltration indiqué par Gomez (2002) sur la Marne, à savoir $2\,800\text{ kgN.km}^{-2}$ sur la période 1971-1999. Par contre, Gomez (2002) indique que les flux d'azote infiltrés varient d'ouest en est suivant un gradient allant de $1\,000$ à $12\,000\text{ kgN.km}^{-2}.\text{an}^{-1}$.

La modélisation effectuée avec CAWAQS permet de représenter l'aspect dynamique du transfert de matière et a été validée sur la période 1977-1988 en utilisant des méthodes géostatistiques (Flipo et al., 2007b). Il existe un processus d'élimination de l'azote en aquifère par dénitrification autotrophe et/ou hétérotrophe (Frind et al., 1990; Kinzelbach et al., 1991; Korom, 1992; Kim et al., 2009; Kunkel et al., 2004; Molénat and Gascuel-Odoux, 2002; Postma et al., 1991; Puckett et al., 2002; Rivett et al., 2008; Wriedt, 2004). Cependant, la composition isotopique en $^{15}\text{N-NO}_3^-$ des eaux d'infiltration du Grand Morin a été analysée par Sebilio (2003), qui a montré qu'il n'y avait pas de différences significatives entre ces dernières et les eaux contenues dans la zone saturée. Il semblerait donc que l'hypothèse de transport conservatif dans les aquifères du Grand Morin soit valide, ce qui est en accord avec le fait que ces aquifères soient pauvres en matière organique et en pyrite.

Globalement, la vision simulée par CAWAQS pour l'année 1988 est cohérente avec la vision statistique (Figure 4.8). La qualité prédictive de CAWAQS a été estimée en fonction du nombre de cellules dont la concentration en nitrate correspond à celle estimée par krigeage, encadrée par son intervalle de confiance (IC) à 95 %, qui se réduit à l'effet de pépité de $5\text{ mgNO}_3.\text{L}^{-1}$ aux

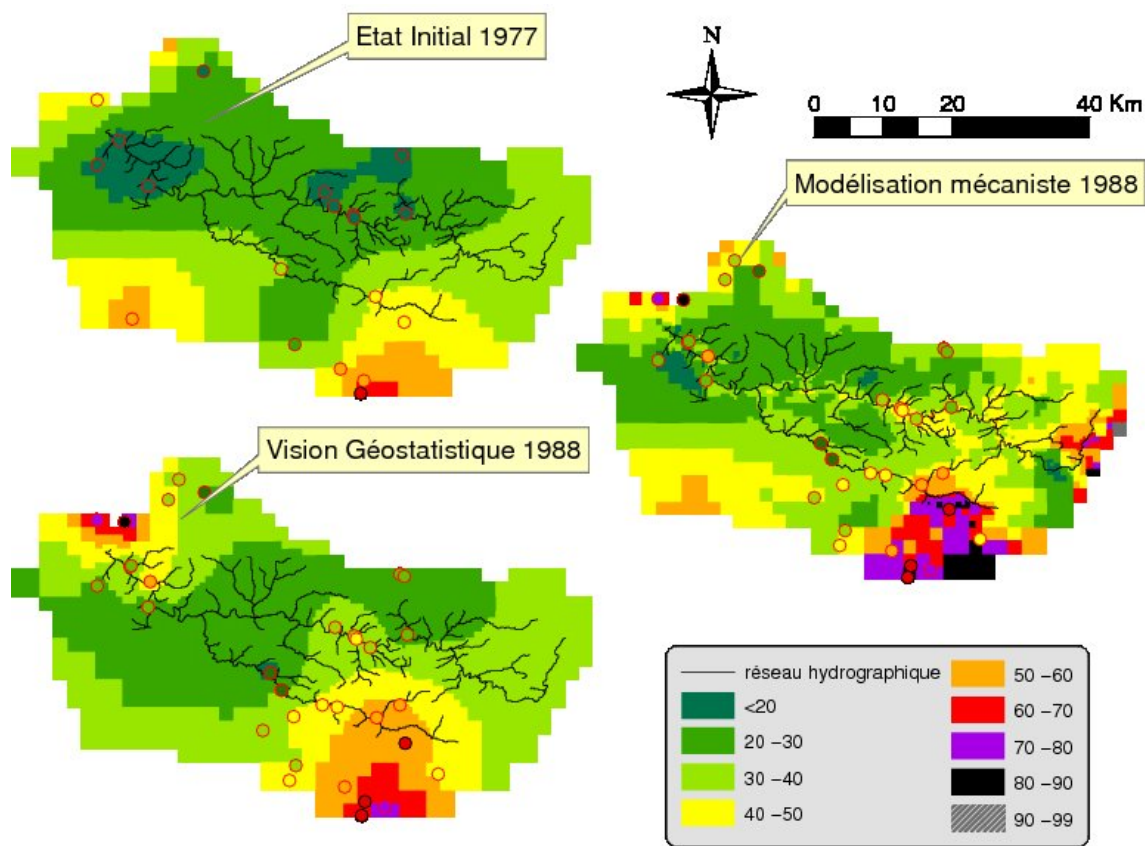


FIGURE 4.8: Concentrations dans l'Eocène en $\text{mgNO}_3.\text{L}^{-1}$. Confrontation de la vision géostatistique avec la modélisation mécaniste. Les points de mesures sont figurés par des ronds, suivant la même échelle de couleur que les mailles. D'après Flipo et al. (2007b)

points de mesure¹⁰. Le modèle déterministe reste dans des gammes de variations acceptables au vu de la structure spatiale des données de nitrates, et seulement 1.9 % des valeurs simulées par CAWAQS sortent de l'intervalle de confiance.

Finalement, le modèle prédit que 40 % du flux d'azote infiltré est stocké dans les aquifères. L'Oligocène stocke 10% du flux infiltré à sa surface, alors que l'Eocène stocke 37 % du flux total d'azote. L'Eocène joue donc un rôle majeur en terme de stockage. Par contre, l'Oligocène a des eaux plus chargées en nitrates ($48.7 \text{ mgNO}_3.\text{L}^{-1}$ en moyenne, ce qui est proche de la norme de potabilité fixée à $50 \text{ mgNO}_3.\text{L}^{-1}$) que l'Eocène ($39.4 \text{ mgNO}_3.\text{L}^{-1}$). Cela se concrétise par une contribution de l'Oligocène de 25 % des flux exportés par les cours d'eau. Finalement, 60 % du flux d'azote infiltré est, en moyenne, exporté par le réseau hydrographique.

Sur la base de l'hypothèse d'un transfert conservatif en rivière, motivée par le fait qu'il n'y ait pas de prélèvements significatifs d'azote liés à la croissance des producteurs primaires dans ce secteur (Flipo et al., 2004), Flipo et al. (2007c) ont établi un bilan des flux de nitrates

10. Le krigeage est un estimateur exact. Aux points de mesure, il estime la valeur exacte observée. Cependant les résultats de simulation sont confrontés à ceux du krigeage sur une grille de référence. Sur cette grille de référence, le krigeage estime la valeur la plus probable. La grille n'étant pas centrée sur les points de prélèvement, chaque valeur estimée par krigeage est, au minimum, encadrée par l'effet de pépité.

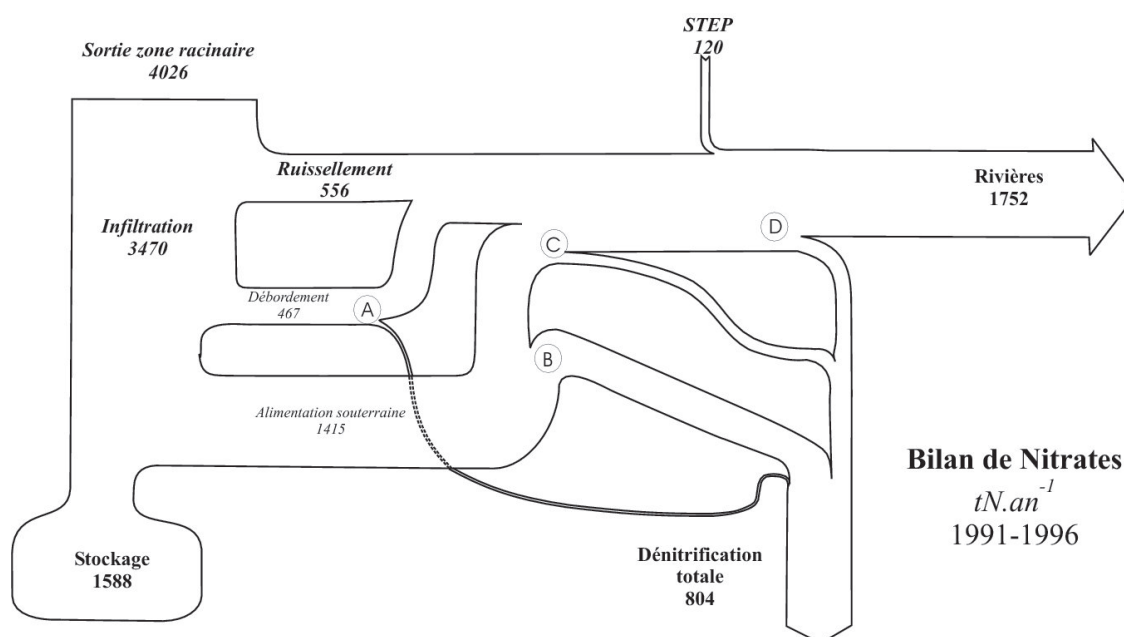


FIGURE 4.9: Flux d'azote moyens sur le Grand Morin en $tN.an^{-1}$. 1^{er} mai 1991 - 5 avril 1996. A : dénitritication des zones humides ; B : dénitritication en nappe alluviale ; C : dénitritication dans la zone hyporhéique ; D : dénitritication par diffusion de la colonne d'eau vers les compartiments benthiques.. D'après Flipo et al. (2007c)

sur le bassin du Grand Morin pour la période 1991-1996 (Fig. 4.9). Le modèle reproduit bien l'apparition des pics d'azote associés au ruissellement de surface pour lequel les nitrates peuvent être considérés conservatifs (Durand and Torres, 1996). L'intensité de ces pics n'est cependant pas toujours bien simulée car il n'existe pas de corrélation significative entre le ruissellement et les concentrations en nitrates car le rôle des organismes hétérotrophes dans l'élimination de l'azote contenu dans les eaux de ruissellement n'est pas bien cerné (Moldan and Wright, 1998). De plus, Soulsby et al. (2003) indiquent que les concentrations en nitrates des eaux de ruissellement baissent au cours des événements pluvieux, ce qui pourrait être aussi lié à une limitation par le stock d'azote présent à la surface du sol. Néanmoins, il apparaît, qu'en moyenne sur la période simulée, le flux de nitrates écoulé à la base de la zone racinaire ($4\,126\,tN.an^{-1}$) est essentiellement exporté par les rivières ($1\,670\,tN.an^{-1}$, soit 41 %), et stocké dans les aquifères ($1\,590\,tN.an^{-1}$, soit 39 %). 20 % de ce flux est éliminé par dénitritication ($800\,tN.an^{-1}$, soit 20 %).

Cependant le modèle ne permet pas d'identifier une zone de dénitritication particulière. Dans la mesure où l'élimination de l'azote dans les sols est simulée par STICS, et où la dénitritication dans les aquifères est négligeable, les sites potentiels de dénitritication sont alors les interfaces nappe-rivière au sens large¹¹ et la rivière elle-même.

11. cf. la notion d'interfaces emboîtées présentée section 3.1.1, p.42

4.3.1.2 Les interfaces nappe-rivière : un moteur de transformation de l'azote

L'estimation du taux d'élimination des nitrates lors de leur cheminement dans le bassin versant est très souvent réalisée à l'aide de modèles qui simplifient les processus, et conceptualisent les écoulements horizontalement sans prendre en compte les hétérogénéités du milieu. Or, ces hétérogénéités génèrent des zones privilégiées d'exfiltration verticale (Angier et al., 2005; Pretty et al., 2006; Rassam et al., 2008). Si ces modèles permettent effectivement d'estimer la part de nitrates éliminés à l'échelle des bassins, une mauvaise conceptualisation de la physique, d'une part, et le problème de l'équifinalité, d'autre part, diminuent très fortement leur valeur explicative, et surtout prédictive. En effet, si un modèle est construit en simulant l'interface nappe-rivière comme éliminant les nitrates avec une cinétique d'ordre un par exemple, alors la calibration et la validation du modèle permettront de conclure que les nitrates sont éliminés à hauteur de X pourcents suivant une cinétique d'ordre un. Cette tautologie ne permet pas de fournir une analyse plus précise du fonctionnement des interfaces nappe-rivière. De nombreux auteurs ont attribué, sur cette base, un rôle fondamental à la "zone riparienne". Tant est si bien que cette zone en est devenue mythique, mais elle y a perdu son identité car elle revêt de multiples visages. Ainsi, peut-elle signifier, soit une bande de végétation couvrant les berges de la rivière (ou ripisylve), soit la totalité d'une plaine alluviale. Son caractère, devenu extrêmement flou, provient de la complexité de l'emboîtement des interfaces nappe-rivière qui a été décrite section 3.1.1, p.42.

Cette complexité fait qu'il est très difficile de caractériser le rôle de cette zone en identifiant les processus séparément, ainsi que les chemins d'écoulement (Green et al., 2010; Puckett, 2004). Il est, par exemple, très difficile d'étudier séparément le champ proche de la rivière, la zone hyporhéique et les premiers centimètres, voir millimètres, des sédiments de fond de la rivière. Les résultats obtenus sur ces zones sont alors difficilement généralisables. Même des techniques analytiques poussées, basées sur le fractionnement isotopique, ne permettent pas de séparer ces compartiments (Sebilo, 2003; McMahon and Böhlke, 1996). Ces techniques permettent néanmoins d'identifier l'origine des nitrates (Feast et al., 1998; Xue et al., 2009), mais des développements restent à réaliser pour les interpréter à l'aide de MMD (Chen and MacQuarrie, 2004). Cependant, il semblerait que les processus de dénitrification, ayant cours dans l'interface nappe-rivière, soient localisés dans la zone hyporhéique située sous la rivière, et non pas seulement dans la zone racinaire des ripisylves (Bardini et al., 2012; Duff and Triska, 2000; Triska et al., 1989). L'élimination des nitrates y serait contrôlée par les temps de transferts lents dans les zones de faibles perméabilités (Krause et al., 2009c; Storey et al., 2004).

Par ailleurs, le type même de modèles à utiliser pour décrire le comportement des nitrates dans ces zones reste encore à définir (Carleton and Montas, 2010). Cependant, certains facteurs font consensus, comme le temps de résidence de l'eau, la concentration en nitrates de l'eau, et le taux de matière organique contenue dans le milieu (Carleton and Montas, 2010; Dahm. et al., 2003; Hill et al., 1998; Kjellin et al., 2007; Peyrard et al., 2011; Rassam et al., 2008; Rivett et al., 2008; Weng et al., 2003). Le contenu en eau du sol et les fluctuations des niveaux d'eau dans l'interface nappe-rivière sont aussi des facteurs de contrôle prépondérants (Burt et al., 2002; Hefting et al., 2004; Rassam et al., 2008; Turlan et al., 2007). La capacité à simuler les écoulements d'eau dans ces interfaces complexes, couplés à des modules biogéochimiques, constituent une des pistes à explorer afin de mieux simuler l'élimination de l'azote dans les interfaces nappe-rivière (Burt, 2005). Un facteur important est aussi le contenu en oxygène de ces zones. Pour des hydrosystèmes riches en nutriments, l'origine du peu d'oxygène présent

dans ces zones reste incertaine. Il pourrait provenir d'une diffusion à l'interface eau-benthos¹², ou d'un transport résiduel par les eaux souterraines de sub-surface. L'oxygène joue un rôle important dans la biogéochimie de l'azote, car, en présence d'oxygène, l'ammonium peut être nitrifié, et donc constituer une source supplémentaire de nitrates (Bardini et al., 2012; Flipo, 2005; Sheibley et al., 2003a,b). Ainsi, Jones and Holmes (1996) indiquent-ils que la zone hyporhéique est un puits de nitrates pour les rivières riches en nutriments, par contre elle est une source de nitrates pour les rivières pauvres en nutriments. Pour complexifier encore un peu la quantification des processus, Storey et al. (2004) rapportent aussi des phénomènes de dénitrification en zone globalement oxiques, par limitation de la diffusion de l'oxygène dans les biofilms fixés sur la matrice de la ZH.

Cependant, ces approches de modélisation ne seront efficaces que couplées à des approches expérimentales de terrain (Oehler et al., 2009), basées sur l'utilisation de traceurs qui permettraient de valider la partie hydrologique du modèle (Burt, 2005; Clément et al., 2003; Curie et al., 2009). Raisin et al. (1999) insistent aussi sur l'importance de bien fermer les bilans de masse dans les études sur les interfaces nappe-rivière, car ils ont relevé certaines zones humides productrices de nitrates et non pas épuratrices. Fermer le bilan d'azote sur une zone géographique nécessite des investissements expérimentaux lourds, car la complexité des processus intervenant à des échelles de temps très variables est difficile à saisir. Saisir cette complexité nécessite de recourir à des échantillonnages haute fréquence, notamment lorsqu'il s'agit de comprendre les dynamiques en rivière (Burns, 1998; Groleau et al., 2012; House and Warwick, 1998a,b). De même que pour l'étude de l'hydrologie des interfaces nappe-rivière, l'étude des flux d'azote nécessite une approche multi-échelle (Dahm et al., 1998). Le suivi de l'impact des interfaces nappe-rivière à l'échelle régionale requiert aussi la mise en place de réseaux de piézomètres. Une autre difficulté apparaît alors, car les eaux souterraines présentent une stratification verticale mal comprise (Flipo, 2005; Macpherson and Sophocleous, 2004). Les fluctuations piézométriques régionales contrôlent aussi la variabilité temporelle des flux d'azote transférés au réseau hydrographique via les interfaces nappe-rivière (Maître et al., 2003; Molenat et al., 2008; Ocampo et al., 2006a,b).

4.3.2 Les nitrates en Seine - Utilisation du modèle linéaire de co-régionalisation

Les nitrates intervenant dans la structure du vivant, ils sont très réactifs. Une fois simulé leur transfert à l'échelle des bassins versants, il convient alors d'être à même de simuler leur devenir en rivière. Afin de comprendre la manière dont le modèle PROSE simule le devenir de l'azote en Seine, le modèle linéaire de co-régionalisation (Annexe B, p.104) est utilisé pour comparer les variabilités spatio-temporelles des variables simulées et observées (Polus-Lefebvre, 2010; Polus et al., 2011). Plusieurs points motivent le choix d'utiliser des techniques géostatistiques pour améliorer l'analyse des erreurs des MMD :

- Le modèle linéaire de co-régionalisation est arrivé à maturité, ce qui rend son utilisation plus aisée (de Fouquet et al., 2012).
- Les couplages entre modèles déterministes et méthodes géostatistiques ont été discutés par de Fouquet (2006) et appliqués au cas de la contamination nitrique à l'échelle d'un bassin versant (Flipo et al., 2007b). Ce type de couplage a aussi été utilisé pour estimer une évapotranspiration distribuée (Casper and Vohland, 2008).

12. Le benthos au sens large comprend les sédiments de la rivière, le périphyton (Descy and Mouvet, 1984; Flipo et al., 2004, 2007a), et la ZH

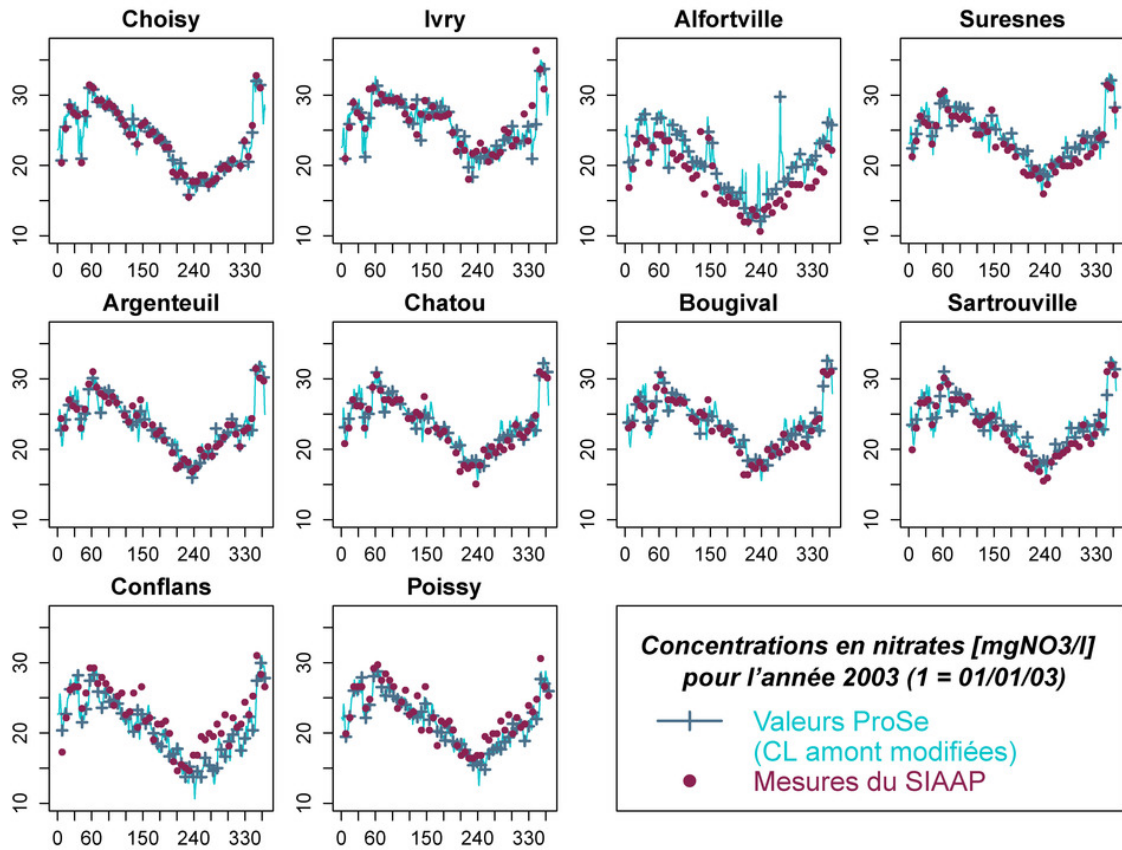


FIGURE 4.10: Chroniques de nitrates mesurées et simulées aux différentes stations de contrôle. D'après Polus-Lefebvre (2010); Polus et al. (2011).

- Le couplage entre méthodes géostatistiques et modèles déterministes permet d'utiliser des critères plus puissants qu'une simple fonction objectif (Polus et al., 2011). En effet l'utilisation d'une seule fonction objectif implique d'intégrer un grand nombre d'incohérences au sein d'un même critère (cf. section 2.3.1, p.24). Même si l'utilisation de plusieurs fonctions objectif peut permettre d'identifier des dysfonctionnements de sous-modules (Güntner et al., 1999), elle ne permet pas de lever le fait qu'un critère intègre plusieurs types d'erreur. De plus, les techniques d'optimisation multi-critère restent toujours à développer (Anderton et al., 2002a,b).
- Finalement, le couplage entre modèles déterministes et méthodes géostatistiques permet de répondre partiellement aux problèmes d'équifinalité (Beven, 1993, 2006a), dans le sens où ce couplage permet de comparer la variabilité des processus observés et simulés (de Fouquet et al., 2007, 2011, 2012; Polus et al., 2011; Vilmin et al., 2013b). Par contre ce couplage ne permet pas de traiter le problème de "l'incommensurabilité"¹³ (Beven, 1989). Cependant, ce type d'approche permet aussi d'identifier des erreurs liées à la définition des conditions limites (Polus-Lefebvre, 2010; Polus et al., 2011).

13. L'incommensurabilité traduit le fait qu'une mesure ponctuelle n'est pas par nature la même grandeur que la même variable simulée sur une grille de modélisation (Ebel and Loague, 2006)

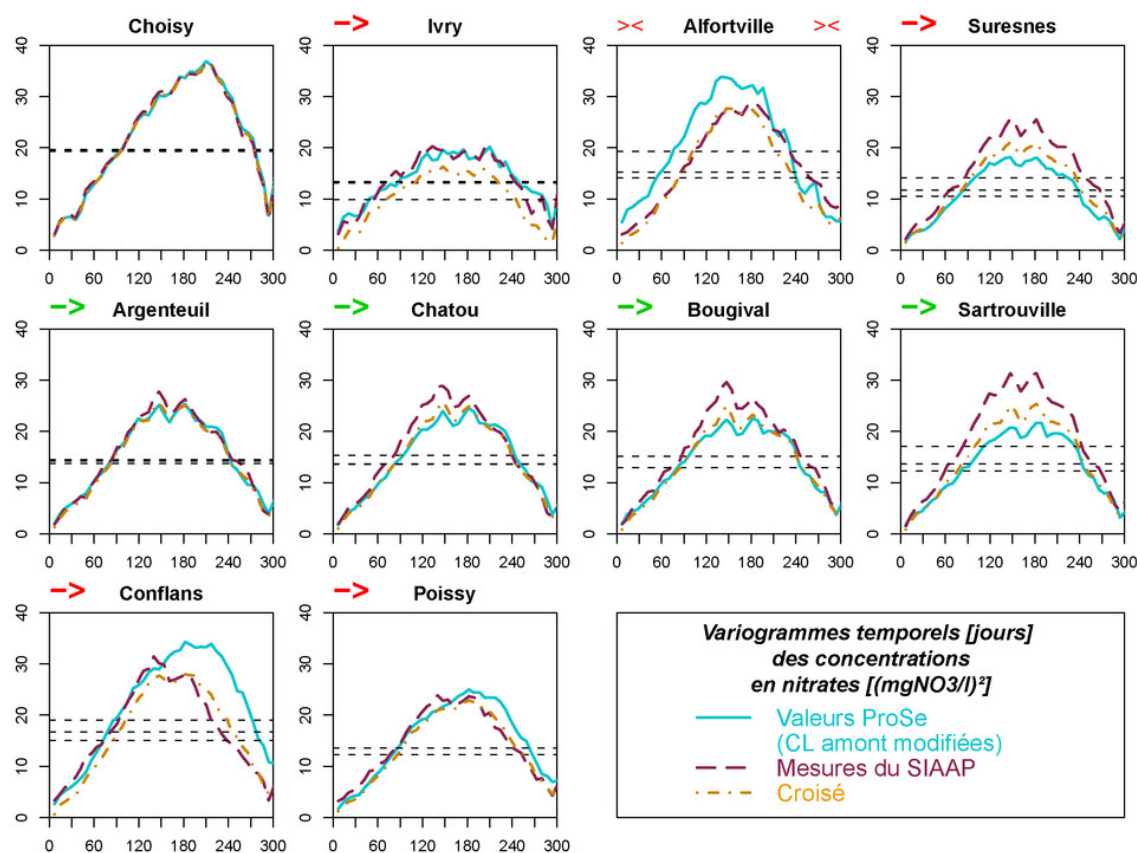


FIGURE 4.11: Variogrammes simples et croisés des chroniques de nitrates mesurées et simulées aux différentes stations de contrôle. Les flèches vertes indiquent une discontinuité de la configuration des variogrammes simples et croisés, les rouges une discontinuité. >< indique que la station est localisée sur la Marne, non pas sur la Seine. D'après Polus-Lefebvre (2010); Polus et al. (2011).

Les résultats de la simulation par PROSE (notées "valeurs PROSE" dans la suite du paragraphe) et les valeurs mesurées de concentrations en nitrates de la colonne d'eau ont été comparées pour l'année 2003 (Polus-Lefebvre, 2010; Polus et al., 2011). La simulation a été réalisée sur l'ensemble du linéaire de la Seine simulé par PROSE (Fig. 4.1, p.71). Comme il a été vu à la section 4.2.2, p.71, le jeu de données a préalablement été homogénéisé. La comparaison entre valeurs PROSE, et valeurs mesurées, est réalisée à chaque station du SIAAP où les concentrations sont mesurées au pas de temps hebdomadaire (Fig. 4.10). L'évolution spatiale des statistiques des différences entre concentrations mesurées et simulées montre que les concentrations en nitrates sont bien simulées par PROSE (cf. annexe D.5, p.184, pour plus d'informations sur les critères).

Si le modèle reproduisait parfaitement les mesures, alors les variogrammes simples des mesures et des valeurs PROSE seraient confondus, ce qui n'est pas le cas (Fig. 4.11). L'ajustement conjoint multi-variable des variogrammes simples et croisés des chroniques mesurées et simulées en chaque station montre que les chroniques mesurées et simulées sont reliées par un modèle linéaire de co-régionalisation décomposé en trois canaux (cf. Annexe B, p.104).

Ainsi chaque signal est composé d'un effet de pépité faible, d'une composante exponentielle admettant une portée d'environ 2 mois, et d'une composante périodique de période annuelle caractéristique de la variabilité saisonnière. La composante saisonnière est largement prédominante en toutes les stations, puisqu'elle explique au moins 75 % de la variabilité des chroniques mesurées (Polus et al., 2011).

Les critères statistiques usuels (moyenne, variance, RMSE,...) montrent que le modèle PROSE reproduit correctement les concentrations en nitrates, tandis que les variogrammes temporels confirment dans l'ensemble la bonne reproduction de la variabilité temporelle des nitrates par le modèle PROSE. Cependant, l'analyse fine par composante a révélé quelques divergences de comportement entre les concentrations simulées et mesurées. En effet, l'évolution des variogrammes temporels simples et croisés (et de leurs relations) le long de la Seine présente des discontinuités (Fig. 4.11), et ces changements de comportements ne se cantonnent pas aux confluences majeures (Seine/Marne entre Ivry et Suresnes et Seine/Oise entre Conflans et Poissy) :

1. Alors que les variogrammes simples et croisés sont quasiment confondus à Choisy, le variogramme croisé apparaît inférieur aux simples à Ivry, ces deux derniers étant presque superposés. La variabilité des données est en majeure partie reproduite par PROSE, mais les structures temporelles ne sont pas bien corrélées. En outre, les variogrammes observés à Ivry sont largement inférieurs à ceux observés à Choisy : la variabilité des concentrations en nitrates est sensiblement lissée entre Choisy et Ivry. Deux singularités peuvent expliquer cette première discontinuité. D'une part, un déversoir d'orage rejette de l'eau dont la concentration en nitrates est négligeable et arbitrairement fixée à $0 \text{ mgNO}_3.L^{-1}$ dans le modèle. La seconde éventualité concerne la station d'épuration (STEP) Seine Amont, qui rejette des eaux très concentrées en nitrates (en moyenne $102 \text{ mgNO}_3.L^{-1}$) mais dépourvues de variabilité saisonnière, ce qui pourrait expliquer le lissage observé. Le changement de comportement des variogrammes entre Choisy et Ivry pourrait donc résulter d'une méconnaissance ou d'une quantification approximative des rejets du déversoir d'orage, de la STEP Seine Amont, ou encore d'une combinaison des deux.
2. Après la confluence Seine/Marne, les valeurs PROSE et les mesures du SIAAP apparaissent fortement corrélées, le variogramme croisé étant systématiquement situé entre les deux simples. À Suresnes, la variabilité saisonnière des valeurs PROSE est toutefois légèrement inférieure à celle des mesures. Un important déversoir d'orage situé à Clichy, entre Suresnes et Argenteuil, est responsable de la deuxième discontinuité, qui conduit à un « recalage » du variogramme des valeurs PROSE à celui des mesures. Entre Argenteuil et Sartrouville, la variabilité des valeurs PROSE s'écarte progressivement de celle des mesures, toujours supérieure. Cette « dérive » dans l'espace s'explique par la légère surestimation des concentrations estivales par le modèle (Fig. 4.10), induite par une nitrification excessive et/ou une dénitrification sous-estimée dans les sédiments¹⁴.
3. La troisième discontinuité est imputable à la STEP Seine Aval, qui traite les eaux usées de cinq millions d'habitants. En aval de cette STEP, les concentrations sont sous-estimées, ce qui pourrait résulter d'une caractérisation approchée des rejets ou d'une surestimation de la dénitrification par le modèle.

14. La dénitrification nécessitant de fortes anoxies, la colonne d'eau n'est pas le siège de la dénitrification.

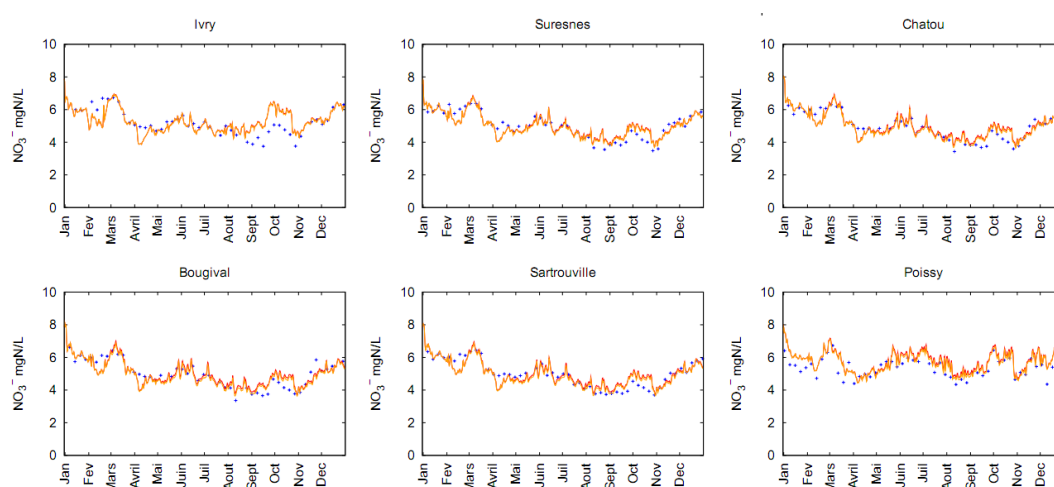


FIGURE 4.12: Concentrations en nitrate mesurées par le SIAAP (croix bleues) et simulées avec une diffusion multipliée par 100 (ligne orange) et divisée par 100 (ligne rouge) pour l'année 2008. D'après Vilmin (2011).

4. La diminution de la variabilité des concentrations en nitrates observée entre Conflans et Poissy est due à la confluence Seine/Oise, visiblement responsable d'un lissage des concentrations.

4.3.3 Rôle des vases dans la biogéochimie de l'azote

Polus et al. (2011) évoquent parfois une mauvaise représentation ou paramétrisation des processus benthiques pour expliquer les écarts entre valeurs simulées et valeurs mesurées. Or, les résultats de la section 4.2.5.2 (p.83) valident l'hypothèse de primauté des processus pélagiques dans la biogéochimie des grandes rivières (Billen et al., 1994; Rode et al., 2010). Cependant il convient de voir si ces conclusions ne sont pas biaisées par une mauvaise estimation des flux diffusifs à l'interface eau-sédiment. À cet effet deux nouvelles simulations de l'année 2008 ont été réalisées (Vilmin, 2011). Le coefficient de diffusion à l'interface eau-vase généralement attribué à toutes les espèces dissoutes pour les simulations annuelles avec PROSE vaut 0.0015 m/s (cf. coefficient β_i section C.4.1, p.122). Ces simulations ont été réalisées afin de mieux simuler les concentrations en nitrates dans la colonne d'eau.

Ce paramètre a d'abord été multiplié par 100 afin de voir si la diffusion simulée n'était pas trop faible et ne limitait pas le pompage benthique drastiquement. Le coefficient de diffusion a ensuite été divisé par 100 pour voir si ce n'était pas une trop forte oxygénation de la couche de vase qui empêcherait la dénitrification d'avoir lieu. Les critères statistiques utilisés (moyenne, écart-type, biais et RMSE) ne permettent pas de souligner de différences significatives entre les deux paramétrisations (cf. Figure 4.12). Il semblerait que la dénitrification simulée dans la couche de vase soit très faible, même pour de faibles coefficients de diffusion. La demande en nitrate dans la vase est donc négligeable par rapport à la concentration dans la colonne d'eau, et ce quel que soit le coefficient de diffusion à l'interface eau-sédiment.

Le modèle est donc peu sensible aux coefficients de diffusion à l'interface eau-sédiment. Les écarts entre concentrations mesurées et simulées ne peuvent donc être expliqués par une erreur de calibration de ce coefficient. Comme il l'avait déjà été remarqué par Flipo (2005), un

modèle sédimentaire mono-couche n'est pas adapté pour simuler les processus benthiques. En effet, même si ce type de modèle permet de simuler le pompage en oxygène ou en ammonium à l'échelle d'un tronçon de rivière (Flipo et al., 2004, 2007a), il ne permet pas de simuler la décroissance verticale très abrupte des concentrations qui génèrent ce flux de pompage (Flipo et al., 2007a; Kasahara and Hill, 2006a). Les concentrations en éléments dissous ne sont alors pas correctement simulées dans les couches benthiques de vase fluide ou de périphyton.

La discrétisation du compartiment benthique pose le problème de son lien avec les écoulements souterrains. La couche de vase fluide est une couche millimétrique très réactive, qui coiffe le toit de la zone hyporhéique. Cette zone est donc contrainte par des flux provenant à la fois de la colonne d'eau et de la zone hyporhéique, qui est par nature une zone de mélange entre les eaux de surface et les eaux souterraines. Pour pouvoir simuler le cycle de l'azote dans cette couche, il convient donc d'être capable de lui fournir des conditions limites pertinentes. Afin de pouvoir simuler les réactions benthiques, la rivière ne doit plus être vue comme un système fermé, mais comme un compartiment de l'hydrosystème connecté aux eaux souterraines via les interfaces nappe-rivière (Claret et al., 1998; Lautz and Siegel, 2007). Au delà des cinétiques de nitrification/dénitrification, les modèles biogéochimiques de qualité d'eau en rivière doivent, à minima, intégrer la notion de condition limite souterraine pour simuler la biogéochimie de l'azote.

4.4 Résumé et Conclusion

Le paradigme d'unicité et de continuité du fonctionnement hydro-écologique des rivières, formulé par Vannote et al. (1980), a permis de faire émerger, dans les années 90, des modèles hydro-écologiques basés sur une représentation individus centrée¹⁵ des processus. Appliqués à de grands réseaux hydrographiques comme le bassin de la Seine, ces modèles ont permis de mieux comprendre le rôle joué par les apports anthropiques, ponctuels et diffus, dans la modification des cycles naturels des éléments nutritifs. Ils ont aussi servi de base à des mesures permettant d'améliorer la qualité des eaux de surface via la réduction des apports ponctuels. Ils sont aujourd'hui au cœur de la mise en œuvre de la Directive Cadre Européenne sur l'Eau, qui vise à atteindre le « bon état écologique » de l'ensemble des eaux de surface.

L'étude de grands bassins versants montre que la modélisation du transfert et de la transformations des pollutions diffuses est une tâche ardue, notamment lorsque ces pollutions transitent par le domaine souterrain qui « stocke » les pollutions. Un des grands défis des années à venir sera d'essayer d'appliquer le paradigme d'unicité et de continuité du fonctionnement hydro-écologique au domaine souterrain. À cet effet, la représentation du comportement dual de certaines espèces comme les mixotrophes¹⁶ sera nécessaire, d'autant plus que l'on peut intuitivement qu'ils jouent un rôle d'importance au sein des interfaces nappe-rivière. La compréhension des propriétés émergentes de l'association d'espèces, au sein de biofilms ou de périphytons¹⁷, constitue aussi un enjeu fort de la recherche en hydro-écologie.

Une meilleure compréhension du rôle biogéochimique joué par les interfaces nappe-rivière constitue aussi un axe prioritaire de recherche pour comprendre le devenir des pollutions

15. Un modèle biogéochimique distribué individus centré intègre la notion fondamentale d'entités ayant ses caractéristiques propres au sein d'un système. Le nombre de paramètres de ce type de modèle est bien inférieur au nombre de paramètres d'un modèle qui définirait le fonctionnement biogéochimique sur la base de cinétiques associées à une discrétisation spatiale.

16. Organismes capables de se comporter comme des autotrophes et des hétérotrophes.

17. Ces milieux sont par essence des interfaces.

diffuses dans les têtes de bassin. À cet effet, le concept d'interfaces nappe-rivière emboîtées, intégrant le compartiment benthique des cours d'eau, décroisonne la rivière de l'hydrosystème dans lequel elle s'inscrit. Il convient maintenant d'imaginer les systèmes de mesure et de modélisation qui permettront de comprendre les processus biogéochimiques sur de larges gammes spatio-temporelles.

Chapitre 5

Conclusion et perspectives

5.1 Bilan des recherches

La modélisation des hydrosystèmes continentaux permet de mieux comprendre les dynamiques spatiales et temporelles des différentes composantes du cycle de l'eau, le fonctionnement des interfaces nappe-rivière, et l'impact de l'anthropisation sur la qualité des eaux (pratiques agricoles, rejets urbains). Une réflexion transverse sur une meilleure imbrication entre stratégies d'échantillonnage et stratégies de modélisation permet aussi de mieux conceptualiser le système et de mieux quantifier ses dynamiques internes.

Tout d'abord, des cartes piézométriques, indispensables à la compréhension et au suivi du fonctionnement des hydrosystèmes, ont été établies à l'aide de techniques d'interpolation. Une comparaison entre des techniques géostatistiques et un nouvel interpolateur spatial basé sur la logique floue (GEO-ANFIS) a été réalisée. Sans conteste, la géostatistique fournit des outils supérieurs à GEO-ANFIS dans la mesure où elle permet d'accéder à des informations sur la fiabilité des valeurs interpolées. De plus, les interpolations sont plus fiables et moins sensibles aux données d'entrée. L'utilisation de cartes piézométriques permet de mettre en œuvre des techniques de calibration automatique, via des approches inverses, de modèles simulant les écoulements souterrains. Ce potentiel a été exploité par la conceptualisation d'une méthodologie hybride d'ajustement de MMD d'hydrosystème. Cette méthodologie a pour objectif d'éviter la sur-paramétrisation d'un modèle lors de la phase de calibration. Pour ce faire, un troisième jeu de données est utilisé en sus des jeux traditionnels de calage et validation. Ce troisième jeu de données permet d'éviter la sur-paramétrisation du modèle, et de s'assurer que le modèle ne dérive pas sur le long terme. Une première application de la méthode a été réalisée dans le cadre de l'étude de l'hydrosystème Loire, et plus particulièrement de l'aquifère de Beauce où la technique d'inversion par estimation successive des flux a été mise en œuvre. Finalement les simulations réalisées avec EauDyssée, couplées à l'utilisation du modèle linéaire de co-régionalisation pour analyser les différentes composantes du cycle de l'eau, mènent à la conclusion que la variation annuelle du stock d'eau contenu dans le système aquifère de la Loire centrale est une variable stationnaire. La valeur moyenne de la variation annuelle du stock, calculée sur 35 ans, est de - 92 Mm³, ce qui, en supposant le modèle parfait, traduit le fait que le système aquifère est en légère sur-exploitation.

Un retour sur le concept d'hydrosystème a ensuite permis de le structurer explicitement autour de ses interfaces emboîtées. Ce cadre théorique permet alors d'aborder la problématique des échanges nappe-rivière en fonction des échelles d'étude, et d'identifier l'échelle intermé-

diaire du corridor fluvial comme étant la clé de voûte des emboîtements d'échelles, ouvrant le dialogue entre les échelles locale et régionale. De plus, ce découpage affiné de l'hydrosystème facilite la réflexion nécessaire à la mise en place de systèmes d'observation multi-échelle du comportement hydrologique des interfaces nappe-rivière aux trois échelles d'intérêt : locale, intermédiaire et régionale. Si les échelles locales et intermédiaires autorisent le déploiement de tels systèmes, une analyse bibliographique approfondie montre qu'il n'en va pas de même de l'échelle régionale, pour laquelle des méthodologies couplant observations et modélisations doivent être développées, avec notamment le développement de systèmes d'observation pertinents permettant de comprendre le fonctionnement des plaines alluviales, qui matérialisent les interfaces nappe-rivière à l'échelle régionale. Afin de répondre à ces défis, une méthodologie hydrogéophysique multi-échelle a été développée dans le cadre de systèmes aquifères multi-couche. Une application de cette méthodologie au bassin expérimental des Avenelles a permis d'y mettre en place un dispositif expérimental basé sur la mesure de la température de l'eau comme traceur des écoulements. Du point de vue de la modélisation, il a été montré que l'utilisation du modèle résistif couplé à une simulation dynamique des niveaux d'eau en rivière permettait de bien simuler, à l'échelle régionale, les comportements piézométriques du champ proche de la rivière à court et moyen termes. Le principal enjeu des années à venir sera de trouver les méthodologies de changement d'échelle permettant de passer des émergences tridimensionnelles locales aux propriétés macroscopiques régissant les flux à l'échelle régionale.

Appliqués à de grands réseaux hydrographiques comme le bassin de la Seine, les modèles basés sur le principe d'unicité et de continuité du fonctionnement hydro-écologique (Vannote et al., 1980), ont permis de mieux comprendre, grâce à la mise en œuvre de modèles hydro-écologiques basés sur une représentation individus centrée des processus¹, le rôle joué par les apports anthropiques, ponctuels et diffus, dans la modification des cycles naturels des éléments nutritifs. Ils ont aussi servi de base à des mesures environnementales permettant d'améliorer la qualité des eaux de surface via la réduction des apports ponctuels. Ils sont aujourd'hui au cœur de la mise en œuvre de la Directive Cadre Européenne sur l'Eau, qui vise à atteindre le « bon état écologique » de l'ensemble des eaux de surface. L'étude de grands bassins versants montre que la modélisation du transfert et de la transformation des pollutions diffuses est une tâche ardue, notamment lorsque ces pollutions transitent par le domaine souterrain qui « stocke » les pollutions.

À l'aide du modèle RIVE, basé sur la représentation individus centrée, couplé à un module de transport hydro-sédimentaire au sein du modèle PROSE, des simulations hydro-écologiques de la Seine et de certains de ces affluents ont été réalisées. Même si elles sont entachées d'erreurs, ces simulations montrent que les processus hydro-sédimentaires jouent un rôle important dans les cycles du carbone, de l'azote, du phosphore et de l'oxygène au sein du réseau hydrographique, et ce même pour la Seine à la traversée de l'agglomération parisienne.

En ce qui concerne l'analyse des incertitudes inhérentes à toute forme de modélisation, le modèle linéaire de co-régionalisation offre un nouvel outil de comparaison de deux cadres cognitifs : les mesures et la description mathématiques des processus. Il permet, entre autres, de discriminer certaines sources d'erreurs des modèles comme la définition des conditions limites ou la description des comportements des individus. Ces analyses permettent de faire

1. La représentation individu centrée part du principe que chaque individu possède ses propres caractéristiques physiologiques. Son comportement dépendra de ces caractéristiques en réaction aux contraintes environnementales.

émerger des pistes d'amélioration des modèles hydro-écologiques, et notamment la nécessité d'y intégrer l'écotone des interfaces nappe-rivière. À cet effet, le concept d'interfaces nappe-rivière emboîtées, intégrant le compartiment benthique des cours d'eau, décloisonne la rivière de l'hydrosystème dans lequel elle s'inscrit et devrait permettre d'étudier les propriétés émergentes de l'association d'espèces au sein de biofilm ou de périphyton. Il convient maintenant d'imaginer les systèmes de mesure et de modélisation qui permettront de comprendre le rôle biogéochimique joué par les interfaces nappe-rivière sur de larges gammes spatio-temporelles.

5.2 Perspectives de recherche

Dans les années à venir, mes recherches s'orienteront vers l'étude et la modélisation de l'impact des interfaces nappe-rivière sur le cycle hydro-biogéochimique de l'eau en contexte de bassins sédimentaires à différentes échelles.

5.2.1 Les attendus de la mesure haute fréquence

Le suivi de la qualité des eaux pose le problème du positionnement des stations de mesure et de la fréquence d'échantillonnage (Dixon and Chiswell, 1996). Si les avancées sur le positionnement des stations ont été notables ces dernières années (Casper et al., 2012; Dixon et al., 1999; Kao et al., 2012; Mouhri et al., 2013a; Park et al., 2006), il n'en va pas de même de la fréquence d'échantillonnage qui est pourtant au cœur de l'estimation (Cooper, 2004; Dixon and Chiswell, 1996; de Fouquet, 2012; Kirchner et al., 2004).

Afin d'aborder la variabilité et la réactivité du fonctionnement trophique d'un écosystème aquatique, une approche basée sur le couplage entre systèmes de mesure en continu, télétransmission, et modélisation temps réel est développée dans le cadre du projet CARBOSEINE (Groleau et al., 2012). Cette approche est devenue possible depuis quelques années pour deux raisons principales et complémentaires. Il y a, d'une part, l'essor d'une nouvelle génération de capteurs commerciaux fiables et relativement peu coûteux, capables de maintenir leur calibration sur de longues durées et de résister aux interactions avec le milieu. Et d'autre part, le domaine de l'instrumentation a bénéficié de développements de systèmes intégrés relativement peu encombrants, très communicants, interfacés en temps réel avec des bases de données. La mesure en continu à haute fréquence fournira les moyens de contraindre le système, de comparer avec précision l'état du milieu naturel avec les résultats du modèle, et par là-même d'améliorer notre compréhension des processus.

Ainsi, le projet CARBOSEINE devrait-il permettre de mieux comprendre les phénomènes hautement transitoires comme le devenir des pollutions liées aux rejets de temps de pluie de l'agglomération parisienne. Cependant plusieurs points restent à approfondir concernant la capacité du modèle PROSe à simuler l'évolution des pollutions anthropiques sur le temps long. Il s'agit, comme il en a déjà été discuté dans le mémoire, de continuer à étudier l'effet de l'accumulation des vases sur la biogéochimie dans la colonne d'eau. Malgré la recalibration du module de transport, des dérives du modèle sur le temps long peuvent apparaître et masquer des problèmes conceptuels. Une démarche en deux temps continuera donc à être suivie :

1. Analyse des processus sur le temps long et identification des améliorations à apporter au modèle à l'échelle de temps infra-hebdomadaire. Cette analyse se fondera sur la comparaison entre les simulations du modèle et les observations faites aux différentes stations des réseaux de mesure. Ces analyses permettront de mieux cerner le fonction-

nement du modèle pour un pas de temps supérieur à la semaine, du fait de la fréquence d'échantillonnage actuellement disponible. Nous utiliserons des comparaisons visuelles des chroniques simulées et des observations ainsi que des critères classiques (biais, écarts quadratiques moyens, ..). Une analyse au second ordre sera ensuite menée à l'aide du modèle linéaire de co-régionalisation. L'analyse spatiale des paramètres ajustés sera alors effectuée pour l'ensemble des variables de qualité d'eau suivant le protocole mis en place par Polus et al. (2011).

2. Sur la base de ces analyses sur le long terme et de l'identification des processus et/ou apports mal décrits, nous utiliserons ensuite les données de CARBOSEINE pour tenter de mieux comprendre la phénoménologie à haute fréquence en identifiant les échelles de temps auxquelles se développent les différents processus. Ces analyses serviront de socle à d'éventuelles re-formalisations de la phénoménologie telle que décrite dans PROSE afin de mieux simuler le métabolisme des rivières, notamment en termes d'oxygénation qui intègre l'ensemble des processus se développant dans les cours d'eau.

Le couplage entre mesures haute fréquence et modélisations simultanées de l'hydrologie urbaine et du milieu récepteur devrait, à terme, permettre de mieux comprendre le fonctionnement des fleuves, et aussi d'améliorer, grâce à une meilleure compréhension des processus, la gestion des effluents des grandes agglomérations (Tabuchi et al., 2013).

5.2.2 Modélisation multi-échelle des interfaces nappe-rivière

Les interfaces nappe-rivière jouent un rôle important dans l'élimination des pollutions diffuses. Les recherches concernant cet écotone seront donc poursuivies avec comme premier objectif de simuler leur fonctionnement hydrologique à l'échelle régionale. Le développement d'un modèle conceptuel calibré se fera sur la base de systèmes d'observation de terrain s'appuyant sur des mesures hydrogéophysiques haute fréquence (Mouhri et al., 2013a), dont la pression et la température. Ces mesures serviront ensuite à paramétrer des modèles aux échelles locale et intermédiaire. Ce premier saut d'échelle servira de base au changement d'échelle depuis l'échelle intermédiaire vers l'échelle régionale en s'appuyant sur les travaux de Saleh et al. (2011), qui ont permis d'aboutir à une estimation des échanges nappe-rivière à l'échelle de 14 000 km de rivières du bassin de Paris (Flipo et al., 2013b).

Afin de pouvoir avancer dans la compréhension du fonctionnement hydrologique des plaines alluviales à l'échelle régionale, la priorité est de concevoir des réseaux d'observation pertinents à cette échelle, ainsi que de mettre en œuvre des techniques de changement d'échelle, structurées autour de la rivière, qui permettront d'intégrer la compréhension des mécanismes locaux à l'échelle régionale. L'analyse de la géomorphologie des bassins versants semble un outil adapté à la définition d'unités structurales homogènes, au sein desquelles des lois de passage entre échelles devraient pouvoir être définies à l'aide d'analyses géostatistiques basées sur la quantification de la variabilité spatiale des champs (charge hydraulique et paramètres hydrodynamiques). De même l'utilisation de données novatrices issues de l'imagerie satellitaire, comme la future mission SWOT (Als Dorf et al., 2007; Biancamaria et al., 2012), offre des perspectives prometteuses pour mieux spatialiser les niveaux d'eau en rivière, et pour améliorer la robustesse des modèles à haute résolution spatiale pour de grandes extensions spatiales. À cet aspect de modélisation, s'ajoute l'opportunité de coupler ces informations spatiales avec des mesures hautes fréquences in situ pour évaluer la capacité de stockage de l'eau des systèmes alluvionnaires (Flipo et al., 2013a).

En termes de modélisation, le concept de cascade d'échelles en vue de la construction d'une plate-forme de modélisation multi-processus, multi-échelle des hydrosystèmes continentaux sera exploré. L'idée novatrice est que le changement d'échelle pourrait être géré par emboîtement de modèles autour des interfaces nappe-rivière, qui peuvent être vues comme des objets communs aux différentes échelles, mais décrits de manières différentes. Les travaux seront structurés autour des corridors alluviaux qui constituent le support du changement d'échelle (cf. section 3.2.1, p.45).

L'objectif principal de la plate-forme sera d'étudier l'impact des interfaces nappe-rivière sur le cycle hydro-biogéochimique de l'eau en contexte de bassins sédimentaires. Le travail débutera par une approche hydrogéophysique (température et pression de l'eau) qui servira ensuite de support à la modélisation du transport réactif de polluants. De manière synchrone, les systèmes de mesures hydrologiques et biogéochimiques haute fréquence devront être couplés au sein d'un système de mesure intégré. Les concepts seront testés sur les bassins versants de la Seine et de la Loire.

Pour résumer, ces travaux devraient permettre d'améliorer la modélisation des interfaces nappe-rivière dans les modèles hydro(géo)logiques distribués, comme EauDyssée et CAWAQS, pour simuler spatialement et temporellement des processus jusque là négligés. À moyen terme, l'utilisation de ces modèles permettra de mieux aborder les problématiques hydrobiogéochimiques de :

- l'élimination des nitrates dans les zones humides qui sont souvent situées à la zone de contact entre les nappes souterraines et la rivière, en tenant compte de la complexité quadri-dimensionnelle (espace-temps) des écoulements ;
- l'effet du changement climatique sur le fonctionnement des hydrosystèmes et plus particulièrement sur l'élimination ou le relargage de polluants par des processus biogéochimiques.

5.2.3 Développements méthodologiques et numériques

Afin d'atteindre ces objectifs, des développements techniques importants seront nécessaires, et plus particulièrement la modularisation et la parallélisation des codes de calculs numériques pour bénéficier de la puissance de calcul actuelle. Utiliser des langages de bas niveaux, comme le C/C++ ou le fortran, couplés par le biais de langages de parallélisation standards, comme le MPI pour des mémoires distribuées ou openMP pour des mémoires partagées², semble une stratégie durable et transférable assez facilement entre les différents systèmes d'exploitation.

Dans une optique d'amélioration de la connaissance, ces codes numériques ne doivent plus être pensés de manière isolée mais comme moteur de calcul de systèmes d'information. Il sera alors indispensable de les interfacer avec des bases de données structurées autour d'un langage universel comme le SQL par exemple, ainsi que de les interfacer avec des logiciels permettant la visualisation des résultats et la manipulation des données d'entrée. De ce point de vue, les Systèmes d'Information Géographiques libres comme QGIS représentent une option intéressante, d'autant plus que ce dernier est programmable grâce au langage standard python.

De plus, cette architecture modulaire permettra de mieux répartir les efforts de calcul en fonction des besoins, et de les concentrer sur les compartiments interfaciaux, pour lesquels une forte discrétisation spatio-temporelle est nécessaire du fait du caractère hautement transitoire des processus s'y développant.

2. Suite à l'émergence des processeurs multi-cœur cette option est intéressante pour bénéficier de la pleine puissance de calcul des machines standard.

Ces développements techniques seront aussi accompagnés de développements méthodologiques permettant de calibrer des plate-formes de modélisation, de minimiser les erreurs, et de les prémunir de certains problèmes majeurs du type sur-paramétrisation.

Du point de vue conceptuel le rapprochement entre les approches mécanistes et statistiques devrait aussi être mis en avant ([Renard, 2007](#)) comme, par exemple, l'intégration du modèle linéaire de co-régionalisation comme module des codes mécanistes. Cette intégration devrait alors permettre de simuler les différents canaux relatifs aux processus et pourrait s'avérer féconde dans l'analyse des incertitudes relatives à la modélisation, ainsi que sur les tendances d'évolution à différentes échelles de temps des anthropo-hydrosystèmes soumis à un environnement changeant.

Annexe A

La plate-forme de modélisation des hydrosystèmes - EauDyssée

La plate-forme de modélisation des hydrosystèmes EauDyssée permet de coupler des modules spécifiques pour modéliser le cycle de l'eau dans un bassin sédimentaire. Dans son état actuel, EauDyssée est une version du code MODCOU qui a été utilisé de multiples fois pour modéliser les écoulements de surface et souterrains dans des bassins d'échelles variées : les bassins de la Haute-Lys (350 km²) et du Caramy (204 km², [Ledoux \(1980\)](#)), une partie du bassin aquitain (14 500 km², [Boukema \(1987\)](#)), le Piton de la Fournaise à La Réunion (980 km², [Violette et al. \(1997\)](#)), le bassin du Rhône (26 500 km², [Etchevers et al. \(2001\)](#); [Golaz-Cavazzi \(1999\)](#); [Golaz-Cavazzi et al. \(2001\)](#); [Habets et al. \(1999a\)](#)), le bassin de l'Adour ($\approx$ 6 000 km², [Habets et al. \(1999b,c\)](#)), le bassin de la Seine (65 000 km², [Gomez \(2002\)](#); [Gomez et al. \(2003\)](#); [Ledoux et al. \(2007\)](#)) ainsi que l'aval du bassin de l'Oise (4 000 km², [Saleh \(2010\)](#); [Saleh et al. \(2011\)](#)), le bassin de la Somme (8 205 km², [Korkmaz et al. \(2009\)](#)), la nappe alluviale du Rhin (4 655 km², [Thierion et al. \(2010, 2012\)](#)), et le bassin de la Loire (120 000 km², [Monteil et al. \(2010\)](#); [Monteil \(2011\)](#)). La plate-forme est aussi utilisée dans le cadre de l'application SIM de Météo France qui effectue les calculs à l'échelle nationale ([Habets et al., 2005, 2008](#); [Quintana-Seguí et al., 2009](#); [Rousset et al., 2004](#); [Thirel et al., 2010](#)).

Dans EauDyssée, l'hydrosystème est conceptuellement divisé en trois compartiments principaux : la surface, la zone non-saturée et la zone saturée. Cinq processus sont associés à ces compartiments : le bilan hydrique de surface (À ce stade, il s'agit de répartir les précipitations en évaporation, infiltration et ruissellement), les écoulements sur les versants, les écoulements en rivière, les écoulements à travers la zone non saturée, et les écoulements souterrains. Chaque processus est modélisé par un module qui peut être activé séparément dans le code (Fig. 2.8, p. 23).

A.1 Le bilan de surface

A.2 Module de bilan hydrique de surface

Le module FP (pour Fonction Production) répartit les précipitations en évapotranspiration réelle (ETR), infiltration et ruissellement sur chaque unité de calcul du bilan hydrique.

La figure A.1 présente le principe d'une fonction production et les formules employées. Pour une unité de calcul considérée, la lame d'eau disponible pour le modèle (EAU [mm]) est

calculée à chaque pas de temps en fonction de la lame d'eau précipitée P [mm] et de l'état du stock en eau R [mm] par rapport aux niveaux minimal et moyen du réservoir sol (DCRT et CRT [mm]). L'évapotranspiration réelle (ETR [mm]) est ensuite prélevée dans la réserve restante à hauteur de l'évapotranspiration potentielle (ETP [mm]).

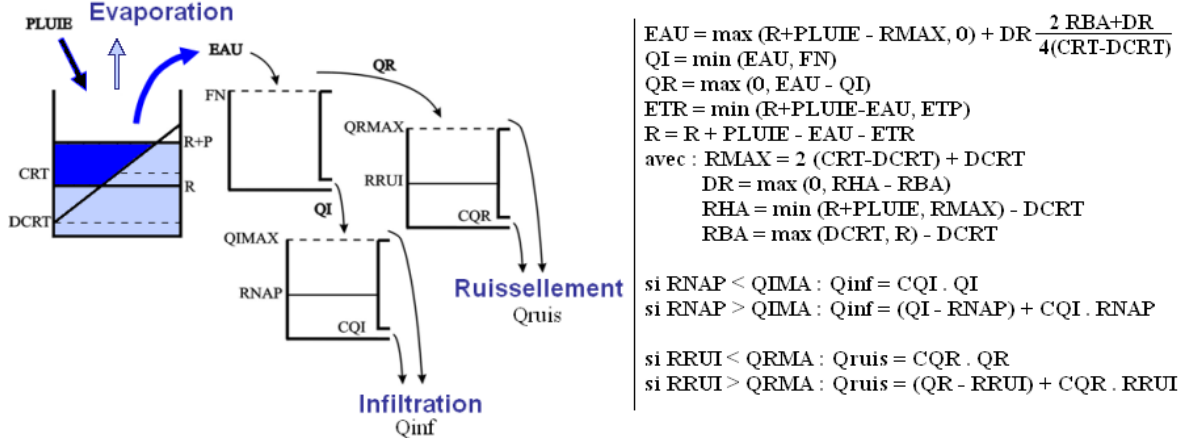


FIGURE A.1: Schématisation d'une fonction production. La quantité EAU est calculée comme l'aire de la zone en bleu sur le schéma. Les variables RMAX, RHA, RBA et DR permettent de calculer EAU suivant la position relative de R et $R+P$ par rapport à DCRT et CRT). D'après [Ledoux \(1980\)](#)

La répartition de la lame d'eau journalière disponible entre ruissellement et infiltration est ensuite simulée à l'aide d'un modèle à trois réservoirs. Le premier réservoir a pour tâche de répartir l'eau disponible en une lame ruisselée QR [mm] et une lame infiltrée QI [mm] en fonction d'un seuil d'infiltration FN [mm]. Deux autres réservoirs de transfert retardent encore l'infiltration et le ruissellement par un mécanisme de vidange exponentielle (coefficients de vidange respectifs CQI et CQR [jr^{-1}]). $RRUI$ et $RNAP$ caractérisent à un instant t le niveau d'eau [mm] dans chacun de ces réservoirs. Le flux d'eau sortant du réservoir simulant l'infiltration est introduit directement dans la zone non saturée où il va être routé par le module NONSAT. Le flux d'eau sortant du réservoir simulant le ruissellement est routé par le module ISOCHRONE.

Les unités de calcul du bilan hydrique sont définies selon l'occupation des sols, la géologie et la maille météo considérée.

A.3 Module de routage sur les versants

A.3.1 L'isochronisme

Le transfert des lames d'eau ruisselées au niveau d'une unité de calcul du bilan hydrique vers une maille rivière est effectué par le module ISOCHRONE ([Ledoux, 1980](#)). Ce calcul implique la discrétisation du domaine en zones isochrones qui rassemblent les mailles présentant une durée de trajet identique jusqu'à leur maille rivière exutoire. Par exemple, la zone isochrone 1 correspond aux mailles dont l'eau ruisselée est routée vers la maille rivière exutoire pendant le pas de temps courant.

En considérant une maille rivière i , le volume d'eau apporté à cette maille au pas de temps t se calcule par la somme sur les n zones isochrones du volume d'eau ruisselé dans chacune des zones isochrones k avec un retard correspondant à la durée de la zone isochrone (Equation A.1). $Q_{ruis_k}^t$ correspond au volume d'eau ruisselé dans la zone isochrone k au pas de temps t .

$$Q_i^t = \sum_{k=1}^n Q_{ruis_k}^{t-(k-1)} \quad (\text{A.1})$$

La mise en place de ces zones isochrones implique les étapes suivantes :

1. calcul d'un indice de transfert $I_{tr}(i)$ pour chaque maille i du maillage de surface en se basant sur les pentes du modèle de terrain,
2. estimation d'un temps de concentration global du bassin,
3. détermination des zones isochrones.

A.3.2 Définition des zones isochrones

Les zones isochrones traduisent le temps que met l'eau à ruisseler de sa maille de production à la maille rivière exutoire. Le pas de temps du modèle de surface étant journalier, les zones isochrones sont définies pour des intervalles de un jour. Pour mettre en place ces zones, il est nécessaire d'estimer le temps de transfert de l'eau dans le schéma de drainage du bassin.

Une première étape consiste à définir un indice de temps de transfert relatif, $I_{tr}(i)$, d'une maille de surface i à sa maille directement à l'aval i_{aval} . Cet indice est calculé à partir des pentes du modèle de terrain (Golaz-Cavazzi, 1999) :

$$I_{tr}(i) = \frac{dl}{\sqrt{\frac{|z(i)-z(i_{aval})|}{dl}} \cdot S_{DA}(i)^\beta} \quad (\text{A.2})$$

où dl [km] est la distance entre les centres des mailles i et i_{aval} , $z(i)$ [km] est l'altitude de la cellule i , $S_{DA}(i)$ [km²] la surface drainée par la maille i et β [-] un paramètre de calage ($\beta=0.25$ d'après Korkmaz (2007)).

Cet indice permet de calculer pour chaque maille i un autre indice $I_{tr_{i \rightarrow exut}}$ caractérisant le temps de transfert relatif de cette maille à l'exutoire du bassin en le sommant le long du réseau de drainage :

$$I_{tr_{i \rightarrow exut}} = \sum_{j=i}^{exutoire} I_{tr}(j) \quad (\text{A.3})$$

L'indice maximal de temps de transfert relatif à l'exutoire est noté $I_{tr_{max}}$.

Pour convertir cet indice de temps de transfert relatif en temps de transfert à l'exutoire $Tt_{exut}(i)$, deux opérations sont nécessaires : normaliser l'indice en le divisant par $I_{tr_{max}}$ puis lui donner une dimension temporelle en le multipliant par un temps de concentration global du bassin noté T_C [jours] :

$$Tt_{exut}(i) = \frac{I_{tr_{i \rightarrow exut}}}{I_{tr_{max}}} \cdot T_C \quad (\text{A.4})$$

Pour attribuer une zone isochrone à une maille, il suffit de faire la différence entre les temps de transfert à l'exutoire de cette maille avec celle de sa maille rivière aval. Les mailles pour lesquelles cette différence est inférieure à 1 jour sont dans la zone isochrone 1 et ainsi de suite.

A.4 Module de routage en rivière

Les volumes d'eau transmis aux mailles rivières sont ensuite routés par le module RAPID (David et al., 2011). Le calcul du routage en rivière est basé sur la méthode de Muskingum (Equation A.5) où $V(t)$ [m^3] est le volume d'eau contenu dans une maille rivière au pas de temps t , $Q_{in}(t)$ et $Q_{out}(t)$ [$\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$] sont les débits d'entrée et de sortie de la maille rivière, k [s] est un temps de transfert entre deux mailles rivière consécutives et α [-] est un paramètre de pondération compris entre 0 et 1.

$$V(t) = k [\alpha Q_{in}(t) + (1 - \alpha) Q_{out}(t)] \quad (\text{A.5})$$

Le paramètre α a été optimisé à 0,02 par David et al. (2011) pour l'ensemble du bassin de la Loire.

La spatialisation du coefficient k se base sur le calcul temps de transferts relatifs calculés pour déterminer les zones isochrones ($Tt_{exut}(i)$, équation A.4). Pour chaque maille rivière, la différence du temps du transfert à l'exutoire entre une maille quelconque et la maille aval est calculée. Pour des raisons de représentativité des valeurs, k est ensuite borné entre 500 s et 2000 s, ce qui correspond à des vitesses comprises entre 0,5 et 2 $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ pour un maillage de 1 km de côté.

A.5 Module de transfert en zone non-saturée

Dans le cas où un aquifère est simulé, l'infiltration calculée par le module de surface est transférée à l'aquifère à travers la zone non-saturée par le module NONSAT (Ledoux, 1980). Étant donné la difficulté de recueillir des informations à l'échelle régionale, sur la répartition verticale de la perméabilité de la zone non saturée, une modélisation conceptuelle à réservoirs est mise en œuvre pour représenter cette zone.

Des études portant sur la relation à l'échelle régionale (Besbes, 1978) entre l'infiltration dans le sol et l'alimentation des nappes ont montré que la fonction de transfert dans la zone non saturée pouvait être assimilée à un modèle à réservoirs en cascade de Nash (figure A.2). Il s'agit d'une cascade de réservoirs à vidange exponentielle. Ce modèle dépend de deux paramètres :

1. le nombre n de réservoirs qui reflète l'épaisseur de la zone non saturée ;
2. la constante de temps de vidange, τ [j], qui caractérise la vitesse de percolation verticale de l'eau.

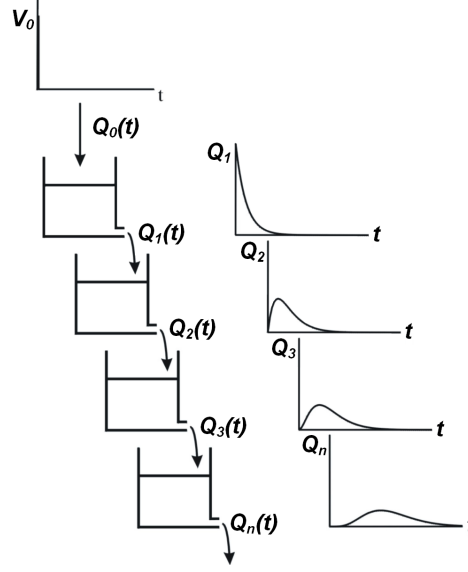


FIGURE A.2: Principe du modèle à réservoirs en cascade de Nash : propagation d'une lame d'eau V_0 . D'après [Ledoux \(1980\)](#).

Dans le module NONSAT, la lame d'eau transmise au réservoir $i + 1$ par le réservoir i au pas de temps j , Q_i^j [mm], est calculée en fonction de V_i [mm], la lame d'eau contenue dans le réservoir i , et de dt [jr], durée du pas de temps de calcul (Équation A.6). Le processus se poursuit de proche en proche jusqu'à épuisement du nombre de réservoirs.

$$Q_i^j = V_i \cdot (1 - e^{-dt/\tau}) \quad (\text{A.6})$$

Ainsi, le débit à l'instant t , à la sortie du $n^{ième}$ réservoir, $Q_n(t)$ [mm.jr $^{-1}$], résultant d'une recharge d'amplitude V_0 [mm] appliquée au premier réservoir à l'instant t' (inférieur à t), s'exprime par la formule :

$$Q_n(t) = \frac{V_0(t')}{\tau \times (n-1)!} \times e^{-(t-t')/\tau} \times \left(\frac{t-t'}{\tau}\right)^{n-1} \quad (\text{A.7})$$

Cette formulation ne prend pas en compte les potentiels débordements de réservoirs.

NONSAT permet donc la prise en compte du retard induit par la zone non-saturée lors du transfert des lames infiltrées vers la nappe.

A.6 Module des écoulements en aquifères

Le modèle SAM a été conçu et mis au point au Centre d'Informatique Géologique de l'Ecole des Mines de Paris pour simuler numériquement, par la méthode des différences finies, les transports d'eau et de masse dans les aquifères multicouches à l'échelle régionale ([Ledoux, 1975](#); [Levassor and Ledoux, 1996](#); [de Marsily et al., 1978](#)).

La simulation des écoulements d'eau est basée sur l'intégration numérique de l'équation de diffusivité régissant les écoulements en milieu poreux. La schématisation multicouches adoptée

distingue des niveaux dits aquifères, sub-horizontaux, sièges d'écoulements en nappe, et des niveaux dits semi-perméables, qui séparent les aquifères, et où les circulations sont faibles. Même si les vitesses d'écoulement y sont faibles, les semi-perméables peuvent assurer des transferts verticaux notables entre les aquifères à l'échelle régionale. Le modèle de transfert souterrain considère que, les écoulements sont bidimensionnels horizontaux dans les aquifères, et monodimensionnels subverticaux dans les semi-perméables. L'équation de diffusivité formalise ces phénomènes :

$$\text{div}(\vec{T} \vec{\text{grad}} h) = S \frac{\partial h}{\partial t} + q + q_{sup} + q_{inf} \quad (\text{A.8})$$

où h est la charge hydraulique [m], $\vec{T}$ le tenseur de transmissivité [m^2/s], S le coefficient d'emmagasinement [-], q : débit prélevé ou injecté par unité de surface [m/s] et q_{sup} et q_{inf} : débits échangés à travers les semi-perméables supérieurs et inférieurs [m/s]. Ces débits échangés sont définis par :

$$q_{sup} = \frac{K_{sup}}{l_{sup}}(h - h_{sup}) \quad \text{et} \quad q_{inf} = \frac{K_{inf}}{l_{inf}}(h - h_{inf}) \quad (\text{A.9})$$

où K et l sont respectivement la perméabilité verticale [m/s] et l'épaisseur [m] du semi-perméable considéré.

L'équation de diffusivité est résolue numériquement suivant la méthode des différences finies. La discrétisation des équations a pour objectif de remplacer le problème de la recherche d'une fonction continue, charge hydraulique $h(x, y, t)$, par celui de la recherche d'un nombre fini de fonctions du temps H_i représentant la valeur moyenne de la charge sur chacune des mailles. Dans le cas multi-couche, l'application de la méthode des différences finies, en formulation implicite, conduit à l'équation suivante, valable pour chaque maille i :

$$\sum_{j=1}^{n_h} T_{ij}(H_j^t - H_i^t) + \sum_{j=1}^{n_v} T_{ij}(H_j^t - H_i^t) = a_i^2 S_i \frac{dH_i}{dt} \Big|_t + q_i^t \quad (\text{A.10})$$

où a_i [m^2] est la surface de la maille i , S_i [-] le coefficient d'emmagasinement de la maille i , n_h le nombre de mailles voisines horizontalement en relation avec la maille i , n_v le nombre de mailles voisines verticalement en relation avec la maille i , et T_{ij} [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$] la transmissivité de passage définie par la moyenne harmonique des transmissivités des mailles i et j .

Si la maille i est en relation avec une rivière, un terme de transfert supplémentaire (Figure A.3, situation 1), $Tp_i(H_0^t - H_i^t)$, apparaît dans le membre droit de cette équation. Tp_i [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$] est un coefficient de transfert nappe-rivière. H_0 [m] est la cote de la rivière.

A chaque pas de temps, la résolution de ces équations fournit la charge hydraulique en tout point du domaine souterrain.

A.7 Échanges nappe-surface

Les échanges entre les nappes et les eaux de surface interviennent à deux niveaux :

- mailles souterraines connectées à une maille de surface sus-jacente par débordement de la nappe si la cote de l'aquifère est supérieure à la cote topographique,

— mailles rivière par la prise en compte des échanges nappe-rivière.

Selon l'état hydraulique du système, deux situations d'échanges entre les nappes et les rivières sont possibles (figure A.3).

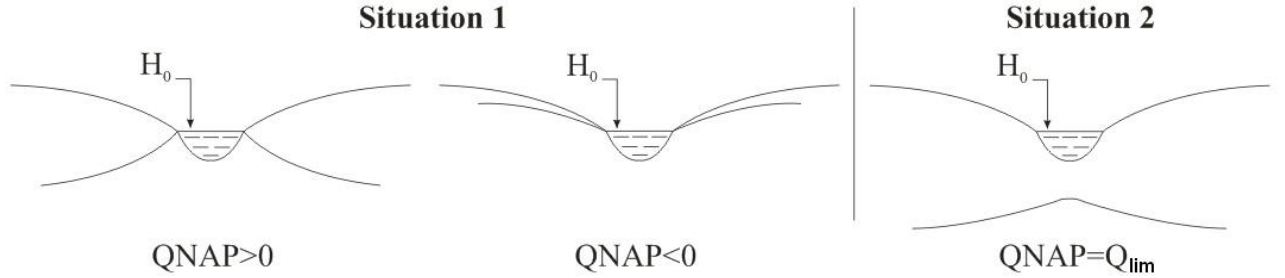


FIGURE A.3: Schématisation de la relation nappe-rivière (Ledoux, 1980).

Situation 1 : La rivière et la nappe sont connectées hydrauliquement, la rivière impose son niveau à la nappe compte tenu d'une perte de charge à travers son lit. Le sens de circulation de l'eau peut éventuellement varier au cours du temps. Le débit échangé Q_{nap} [$m^3.s^{-1}$] est égal à :

$$Q_{nap} = Tp(H - H_0) \quad (A.11)$$

où H représente le niveau piézométrique de la nappe [m], H_0 la cote de la rivière [m] et Tp le coefficient de transfert régulant la perte de charge entre la nappe et la rivière [$m^2.s^{-1}$]. Dans le cas d'une infiltration de la rivière vers la nappe, il est nécessaire de prendre en compte le volume d'eau disponible en rivière.

Situation 2 : La rivière et la nappe sont connectées par la présence d'une zone non saturée. Dans ce cas le transfert s'effectue dans le sens de la rivière vers la nappe avec une valeur donnée de débit limite Q_{lim} [$m^3.s^{-1}$] :

$$Q_{nap} = Q_{lim} \quad (A.12)$$

Annexe B

Le modèle linéaire de co-régionalisation : un outil de comparaison de simulations aux observations

Avis au lecteur

Cette annexe n'est aucunement un cours de géostatistique ; elle vise à expliquer l'intérêt et la nature du modèle linéaire de co-régionalisation largement utilisé dans les travaux de ce mémoire. Pour plus de détails sur les notions de base en géostatistiques se référer à [Matheron \(1970, 1978\)](#); [Chauvet \(1999\)](#); [Chilès and Delfiner \(1999\)](#), ou encore à l'annexe C de [Flipo \(2005\)](#). Pour ce qui concerne le modèle linéaire de co-régionalisation, se référer à l'annexe A de [Polus et al. \(2010\)](#), [Polus et al. \(2011\)](#), ou à [Chilès et al. \(2008\)](#) et [de Fouquet et al. \(2012\)](#).

Le modèle linéaire de co-régionalisation en bref

Le modèle linéaire de co-régionalisation permet de décomposer les signaux observés (O) et simulés (S) en canaux de même "longueur de réponse". En prenant le cas temporel, les signaux sont décomposés en canaux fréquentiels. Le modèle linéaire de co-régionalisation fournit alors, par canal, des informations quantitatives sur la similitude entre le canal simulé et le canal observé. Dans bien des cas en sciences de la Terre les écarts entre simulations et observations sont analysables à l'aide du modèle linéaire de co-régionalisation, mais ils ne correspondent pas à un modèle à résidus ([de Fouquet et al., 2012](#)).

B.1 Décomposition linéaire des observations (O) et simulations (S)

Le modèle linéaire de co-régionalisation ([de Fouquet et al., 2007, 2011, 2012](#); [Polus et al., 2010, 2011](#)) repose sur un modèle de variogramme bivariable au sens géostatistique. Soient

$O(x)$ et $S(x)$ deux variables¹ aléatoires (VA) distribuées selon le temps ou l'espace, notés indifféremment x . Pour une meilleure lisibilité de l'annexe, O désigne des observations ou mesures, et S des résultats de simulation.

On note respectivement γ_O et γ_S les variogrammes de O et S . γ_{OS} est le variogramme croisé de O et S , soit :

$$\gamma_{OS}(\tau) = \frac{1}{2} E [(O(x+\tau) - O(x)) \cdot (S(x+\tau) - S(x))] \quad (\text{B.1})$$

Pour le modèle linéaire de co-régionalisation, les deux variables O et S correspondent à la combinaison linéaire² de n composantes $O_i(x)$, et n composantes $S_i(x)$. (Eq. B.2).

$$\begin{cases} O(x) &= \sum_{i=1}^n O_i(x) \\ S(x) &= \sum_{i=1}^n S_i(x) \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

$\forall i \neq j, O_i \perp O_j, S_i \perp S_j, O_i \perp S_j$, où $\perp$ signifie que les différentes composantes ne sont pas corrélées, *i.e.* leur covariance croisée est nulle (et donc variogramme croisé noté γ_{OS}^i) :

$$\forall i \neq j, \forall x, \forall x', \text{Cov}(O_i(x), O_j(x')) = 0 \quad (\text{B.3})$$

Chaque signal est donc subdivisé en n composantes ou **canaux**, et le variogramme du signal est égal à la combinaison linéaire des variogrammes des canaux. La subdivision des signaux observés et simulés en canaux s'effectue par ajustement de plusieurs modèles variographiques³ au signal observé. Ainsi, le variogramme des observations, s'écrit :

$$\gamma_O = \sum_{i=1}^n \gamma_{O_i} \quad (\text{B.4})$$

B.2 Relation entre les n canaux de O et S

La relation entre O et S est alors décrite par la corrélation entre les n canaux, indexés i . Pour un canal i donné, la relation entre O_i et S_i s'écrit :

$$\exists \omega_i, \rho_i, \text{ et } R_i \perp S_i \mid O_i(x) = \rho_i \omega_i S_i(x) + \omega_i \sqrt{1 - \rho_i^2} R_i(x), \quad (\text{B.5})$$

Avec ω_i^2 le **rapport de paliers**, et ρ_i le **coefficient de corrélation** entre O_i et S_i . $R_i(x)$ est une variable aléatoire non corrélée à $S_i(x)$, mais avec un variogramme proportionnel à celui de S_i ⁴. Ainsi, les variogrammes des canaux O_i ($\gamma_{O_i}^i$), et S_i ($\gamma_{S_i}^i$), ainsi que le variogramme croisé (γ_{OS}^i) sont liés par une relation de proportionnalité à un variogramme tierce (γ_i) tel que :

$$\gamma_O^i(\tau) = b_{OO}^i \gamma_i(\tau), \gamma_S^i(\tau) = b_{SS}^i \gamma_i(\tau), \gamma_{OS}^i(\tau) = b_{OS}^i \gamma_i(\tau).$$

1. Le géostaticien préférera le terme de fonction

2. C'est de cette décomposition linéaire que provient le terme linéaire du modèle linéaire de co-régionalisation. Il s'agit de la seule hypothèse de linéarité pour la mise en œuvre du modèle. Par contre si les signaux O et S ne peuvent pas être décomposés en n signaux similaires alors le modèle ne peut pas être mis en œuvre tel quel.

3. Chaque modèle variographique correspond à un canal.

4. La démonstration est fournie par Polus et al. (2011)

Le rapport des paliers s'exprime alors par $\omega_i^2 = \frac{b_{OO}^i}{b_{SS}^i}$, et le coefficient de corrélation par $\rho_i = \frac{b_{OS}^i}{\sqrt{b_{OO}^i b_{SS}^i}}$, avec $|b_{OS}^i| \leq \sqrt{b_{OO}^i b_{SS}^i}$.

L'analyse de la relation entre les signaux O_i et S_i se base alors sur l'interprétation des valeurs du rapport de paliers et du coefficient de corrélation. Si le rapport de paliers est supérieur à 1, alors les valeurs simulées sous-estiment la variabilité des observations. Cette analyse permet de quantifier le niveau de simulation d'une composante d'un signal observé par un modèle.

B.3 Interprétation des relations entre O et S

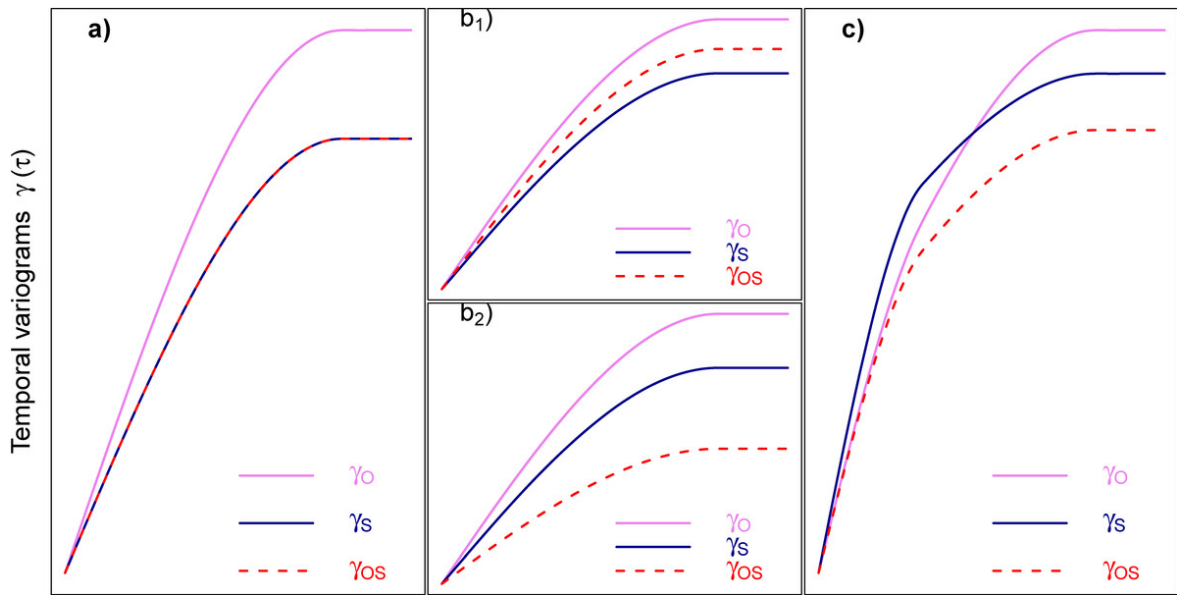


FIGURE B.1: Types de relations entre les variogrammes de O et S . a) Modèle à résidus ; b) Modèle de corrélation intrinsèque ; c) Modèle linéaire de co-régionalisation. Extrait de Polus et al. (2011).

Dans le cadre d'une possible décomposition de O et S en canaux similaires, il existe alors trois modèles de relation entre O et S (Fig B.1) :

1. Modèle à résidus : O est la somme de S et d'un résidu, R , totalement indépendant de S , soit $S \perp R$. La relation entre O et S est directement analysable ;
2. Modèle de corrélation intrinsèque : Les variogrammes simples et croisés de O et S sont proportionnels entre eux. La corrélation entre O et S est indiquée visuellement par la position du palier du variogramme croisé (plus elle est élevée, meilleure est le coefficient de corrélation). La relation entre O et S est directement analysable ;
3. Modèle linéaire de co-régionalisation : L'un des deux modèles précédents s'applique à chaque canal. La relation entre O et S ne peut s'analyser que par canal (i.e. $\exists i \neq j \mid \rho_i \neq \rho_j$ ou $\omega_i \neq \omega_j$). La relation entre O et S n'est pas analysable directement.

Annexe C

Le modèle hydroécologique ProSe - version 3.6.5

Le logiciel PROSE (Even, 1995; Even et al., 1998, 2004, 2007b; Flipo et al., 2004; Flipo, 2005; Flipo et al., 2007c; Vilmin et al., 2012b,a), développé dans le cadre du PIREN SEINE, permet une analyse fine du comportement de systèmes aquatiques en réponse à diverses actions anthropiques. Il permet de simuler l'impact de tout type de pollutions, ponctuelles ou diffuses, en rivière. Les pollutions prises en compte peuvent être des apports permanents, comme par exemple les rejets de station d'épuration, ou des apports transitoires, tels que les rejets urbains de temps de pluie (Even et al., 2004, 2007b). Pour répondre à ces objectifs, des choix conceptuels ont été réalisés dans le but de pouvoir représenter, pour des échelles spatio-temporelles fines, les impacts avec une bonne précision.

Le logiciel comprend (Figure C.1) :

1. un module hydraulique basé sur la résolution monodimensionnelle des équations de Saint-Venant. Ce calcul permet de représenter les contraintes physiques (vitesses, hauteur d'eau, section mouillée) en chaque point du système à partir du débit amont, des débits des apports, des contraintes aux barrages, et de la bathymétrie ;
2. un module de transport représentant la convection et les processus de dispersion. Plusieurs schémas numériques ont été programmés pour pouvoir traiter différentes problématiques (pollutions accidentelles présentant des fronts de pollution abrupts et nécessitant un traitement numérique fin, pollutions chroniques présentant des variations sur de longues périodes et pouvant être traitées plus simplement). En ce qui concerne le transport particulaire, les processus de sédimentation et d'érosion sont simulés ;
3. un module biogéochimique de réactions entre les constituants fondé sur le schéma conceptuel de RIVE (Billen et al., 1994; Garnier et al., 1995). Ce modèle a été élaboré en concertation avec différentes équipes du PIREN SEINE.

C.1 Le module hydraulique - équations de Saint-Venant

Du point de vue de PROSE, la rivière est mono-dimensionnelle et caractérisée par les éléments suivants :

- *les points singuliers* : seuils, diffluences (point de séparation des débits au droit d'une île) ou confluences, tout point de changement important de la morphologie du lit comme

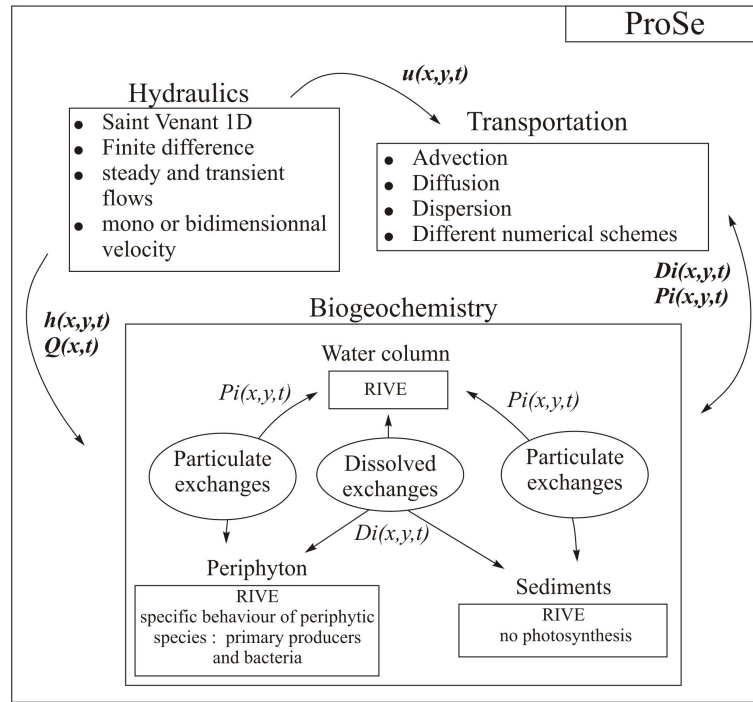


FIGURE C.1: Schéma conceptuel simplifié de PROSE ; h est la hauteur d'eau, u la vitesse, Q le débit, Di et Pi représentent les phases dissoutes et particulaires de la variable i . D'après Flipo et al. (2004).

Les variables hydrauliques de ProSe		
g	Constante universelle de gravité	$[LT^{-2}]$
h	Hauteur d'eau	$[L]$
q	Débit latéral d'apport (ou prélèvement) linéique	$[L^2T^{-1}]$
u	Composante longitudinale de la vitesse en un point de la section transversale	$[LT^{-1}]$
z	Cote de la surface libre	$[L]$
J	Pente de frottement	[sans dimension]
K_S	Coefficient de Strickler	$[L^{\frac{1}{3}}T^{-1}]$
P_m	Périmètre mouillé	$[L]$
Q	Débit	$[L^3T^{-1}]$
R_H	Rayon hydraulique, $R_H = \frac{S}{P_m}$	$[L]$
S	Surface mouillée d'une section transversale	$[L^2]$
U	Vitesse moyenne de l'eau	$[LT^{-1}]$
β	Fonction de la répartition des vitesses dans la section transversale	[sans dimension]

TABLE C.1: Notations utilisées pour l'hydraulique de PROSE

des seuils naturels, ou des changements dans les caractéristiques du lit avec le passage d'une zone naturelle à un secteur aménagé, etc ;

— les *biefs* qui sont des parties de rivières délimitées par deux points singuliers et où les

équations de SAINT-VENANT sont considérées comme valides ;
 — les *tronçons* ou mailles de calcul, correspondant aux subdivisions de bief.
 D'après les hypothèses suivantes :

1. l'écoulement est filaire : les variables déterminant l'écoulement (vitesse, débit, hauteur d'eau...) sont uniformes dans toute section transversale. Cette hypothèse implique

$$Q = US$$

2. l'écoulement est *quasi* horizontal. L'angle que forme le fond de la rivière avec l'axe des x est faible ($\cos \delta \approx 1$) ;
3. la courbure des lignes de courant est faible. Les forces centrifuges sont négligeables et la répartition des pressions est hydrostatique dans toute section droite de la rivière ;
4. la masse volumique de l'eau est constante ;

l'intégration des équations de Navier Stokes conduisent aux équations monodimensionnelles de Saint-Venant ([Chow, 1959](#); [Cunge et al., 1980](#); [Hug, 1975](#); [Saint-Venant, 1871](#); [Saleh, 2010](#)) :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = q \quad (\text{C.1})$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{S} \right) + gS \frac{\partial z}{\partial x} = -gSJ + \varepsilon QU \quad (\text{C.2})$$

$$\varepsilon = \begin{cases} 1, & \text{pour un prélèvement d'eau à la même vitesse que l'écoulement,} \\ 0, & \text{pour un apport transversal} \end{cases}$$

L'équation [C.1](#) exprime la conservation de la masse, tandis que l'équation [C.2](#) exprime la conservation de la quantité de mouvement. Les variables décrivant l'écoulement (débit Q , vitesse u , surface mouillée S et cote de la ligne d'eau z) sont des fonctions de l'abscisse curviligne x et du temps t . L'écoulement de la rivière est caractérisé par deux variables Q ou u et z ou S , connues en tout point de la rivière et à chaque instant.

L'équation de conservation de la masse traduit le fait que la variation de la masse à l'intérieur d'un volume de section transversale S et de longueur Δx est égale au bilan des flux massiques entrant et sortant.

L'équation relative à la quantité de mouvement, ou équation dynamique, est établie à partir du théorème de la conservation de la quantité de mouvement, à savoir que la variation de la quantité de mouvement dans un volume est égale à la somme des forces extérieures s'exerçant sur ce volume. Les forces extérieures sont la gravité, la pression et le frottement. Plusieurs termes apparaissent dans l'équation [C.2](#) ([Even, 1995](#)) :

$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{S} \right)$ **représentent les termes d'inertie** et correspondent aux termes d'accélération :

- $\frac{\partial Q}{\partial t}$, **l'inertie temporelle**, apparaît si des variations sont imposées aux variables débit ou cote ;
- $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{S} \right)$, **l'accélération convective**, est due aux variations de section. Ce terme correspond à : $\int_S u^2 d\sigma = \beta S U^2$. Dans PROSE, on pose $\beta = 1$ ce qui sous entend que le régime est uniforme. Cependant, l'erreur sur les débits et hauteurs d'eau liée à cette approximation reste souvent inférieure à 1% ([Xia and Yen, 1994](#)).

Les variables du transport		
C	Concentration du constituant considéré	$[\text{ML}^{-3}]$
D	Coefficient de dispersion	$[\text{L}^2\text{T}^{-1}]$
F	Flux de matière	$[\text{MT}^{-1}]$
M	Masse de constituant	$[\text{ML}^{-1}]$
Q	Débit	$[\text{L}^3\text{T}^{-1}]$
R	Bilan des réactions bio-chimiques	$[\text{MT}^{-1}\text{L}^{-1}]$
S	Section mouillée	$[\text{L}^2]$
U	Vitesse moyenne de l'eau	$[\text{LT}^{-1}]$
φ	Flux linéique	$[\text{MT}^{-1}\text{L}^{-1}]$

TABLE C.2: Variables de PROSE décrivant de transport

$gS \frac{\partial z}{\partial x}$ **est le terme de pression** . Dans les approximations de SAINT-VENANT, la pression est supposée hydrostatique.

gSJ **correspond au terme de frottement** sur le fond et les rives. J est la pente de frottement qui est définie, sous l'hypothèse d'un régime uniforme, par la formulation de Manning-Strickler :

$$J = \frac{Q^2}{K_S^2 S^2 R_H^{\frac{4}{3}}} \quad (\text{C.3})$$

En pratique, le paramètre K_S , qui doit être calé, varie entre 5 (écoulements rugueux) et 70 (écoulements lisses) (Lencastre, 1966).

Les ouvrages hydrauliques peuvent être représentés par trois types de lois :

- des lois de cote imposée en fonction du temps,
- des lois de débit imposé en fonction du temps,
- des lois de déversement exprimant le débit déversé en fonction de la charge du barrage.

Les équations de Saint-Venant sont résolues, dans PROSE, par une méthode aux différences finies, basée sur le schéma semi-implicite de Preissmann (Cunge, 1986).

C.2 Transport

Les caractéristiques hydrodynamiques de l'écoulement déterminent l'évolution de composés biochimiques dans le milieu via des phénomènes de transport et par des réactions biogéochimiques. L'advection correspond au transport d'un constituant, dissous ou particulaire, à la vitesse moyenne de l'eau. Simultanément ce constituant subit des processus de mélange, c'est la dispersion. De plus, des réactions biogéochimiques contribuent à la transformation de ce constituant. La loi, monodimensionnelle, de conservation de la masse d'un constituant, dissous ou en suspension dans la rivière, traduit l'ensemble de ces processus :

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} + R \quad (\text{C.4})$$

Le flux de matière F se divise un terme d'advection, et un terme de dispersion. Le flux advectif est QC alors que le flux dispersif est exprimé, à l'aide de la loi de Fick, par $-DS \frac{\partial C}{\partial x}$.

L'équation générale de transport s'écrit :

$$\frac{\partial(SC)}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial(QC)}{\partial x}}_{\text{advection}} - \underbrace{DS \frac{\partial C}{\partial x}}_{\text{dispersion}} = \varphi + R \quad (\text{C.5})$$

Dans PROSE, les calculs de l'advection et de la dispersion sont découplés afin de pouvoir utiliser différents schémas numériques de résolution de l'advection¹. La biologie et le transport sont aussi découplés. La résolution de l'équation de transport est résolue en deux étapes à l'intérieur de chaque boucle temporelle :

- l'équation d'advection fournit des solutions intermédiaires, C_i^* , issues de l'advection pure.
- l'équation de dispersion utilise les concentrations C_i^* comme concentrations connues.

Les solutions sont alors les concentrations, à la fin du pas de temps, après advection-dispersion.

C.2.1 L'advection

Le flux advectif traduit le transport du constituant à la vitesse moyenne de l'eau. Dans PROSE, l'équation représentant l'advection pure est résolue sous sa forme conservative :

$$\frac{\partial(SC)}{\partial t} + \frac{\partial(QC)}{\partial x} = \varphi \quad (\text{C.6})$$

$SC\Delta x$ représente la quantité de matière dans le volume considéré, QC le flux advectif, φ les apports linéiques.

La méthode classique aux différences finies utilisant un schéma décentré amont en résolution implicite² est la plus fréquemment utilisée.

C.2.2 La dispersion

Le flux dispersif intègre l'ensemble des processus participant au mélange des particules :

- la diffusion moléculaire ;
- le mélange par turbulence (intervenant seulement sur de courtes distances, appelées distances de mélange) ;
- la dispersion par convection différentielle.

Pour la dispersion longitudinale, seul le troisième terme est prépondérant (Even, 1995). Les processus de mélange dans le cours d'eau peuvent être représentés par la loi de Fick, qui traduit le déplacement des particules en fonction des gradients de concentration (Fischer et al., 1979). L'équation de dispersion est la suivante :

$$\frac{\partial(SC)}{\partial t} - \frac{\partial(DS \frac{\partial C}{\partial x})}{\partial x} = 0 \quad (\text{C.7})$$

Une résolution semi-implicite avec un schéma aux différences finies est envisagée (Crank-Nicholson). Cette méthode de résolution n'implique aucune condition de stabilité.

1. Schéma décentré amont, schéma de Bott, méthode des caractéristiques.

2. Ce schéma est inconditionnellement stable, contrairement à une méthode explicite où le nombre de courant doit être inférieur à 1.

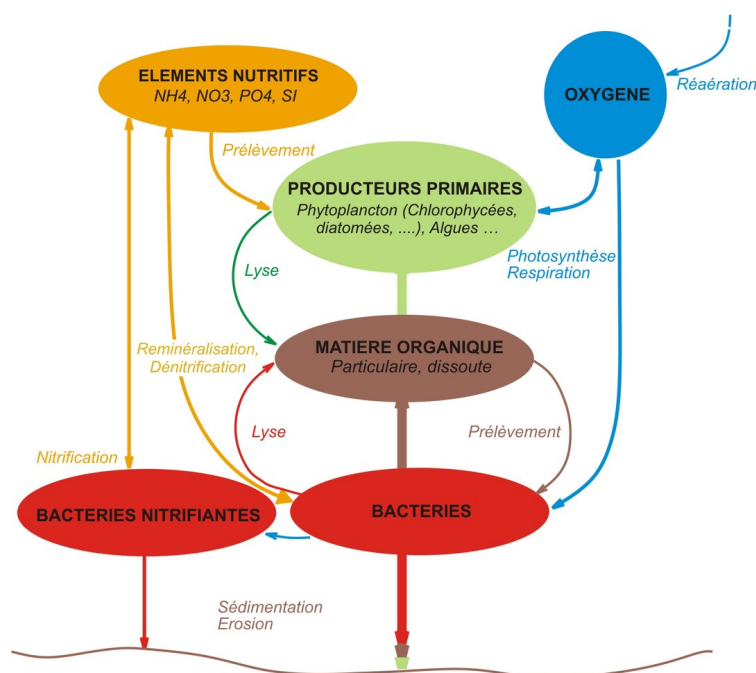


FIGURE C.2: Schéma conceptuel simplifié de RIVE.

C.3 La biogéochimie en rivière - adaptation du modèle rive

D'un point de vue biogéochimique, la rivière est divisée en trois compartiments : la colonne d'eau, les sédiments et le périphyton³. Le jeu de variables est homogène dans tous les compartiments. Les processus modélisés dans la colonne d'eau sont ceux représentés dans le modèle RIVE (Billen et al., 1994; Garnier et al., 1995) qui représente des processus et des variables impliqués dans le cycle du carbone, des nutriments associés (azote, phosphore, silice), et de l'oxygène (Figure C.2).

Le modèle a été adapté pour représenter tous ces processus dans les vases (Even et al., 2004), d'une part, et dans le périphyton (Flipo et al., 2004), d'autre part.

Les variables et paramètres de rive

α^{**}	Capacité photosynthétique	$[L^2 \mu E^{-1}]$
β^{**}	Capacité de photoinhibition	$[L^2 \mu E^{-1}]$
γ	Masse volumique du sédiment	$[ML^{-3}]$
δ	Fraction d'ammoniaque transformée en nitrates dans les sédiments	[sans dimension]
ϵ_p	Fraction de la biomasse autochtone recyclée en matière organique particulaire c	[sans dimension]
ϵ_d	Fraction de la biomasse autochtone recyclée en matière organique dissoute	[sans dimension]
η	Coefficient d'extinction lumineuse	$[L^{-1}]$

3. Le périphyton est "une communauté complexe de microbiota (algues, bactéries, champignons, animaux, détritiques organiques et inorganiques) qui est attachée au substrat qu'il soit organique ou inorganique, vivant ou inerte" (Wetzel, 1983).

η_{base}	Terme de base de l'extinction lumineuse	$[\text{L}^{-1}]$
η_{mes}	Terme de l'extinction lumineuse fonction des MES	$[\text{L}^2\text{M}^{-1}]$
η_{chla}	Terme de l'extinction lumineuse fonction de la biomasse phytoplanctonique	$[\text{L}^2\text{M}^{-1}]$
μ^*	Taux de croissance	$[\text{T}^{-1}]$
μ_i^*	Taux de croissance de l'espèce i	$[\text{T}^{-1}]$
μ_{max}^*	Taux de croissance maximal	$[\text{T}^{-1}]$
τ_i	Coefficient stœchiométrique de consommation d'oxygène par respiration pour l'espèce i	$[\text{MM}^{-1}]$
h	Profondeur de la colonne d'eau	$[\text{L}]$
k_C^*	Vitesse de transformation de la matière organique particulaire en dissous	$[\text{T}^{-1}]$
k_D	Taux de disparition total	$[\text{T}^{-1}]$
p_{O_2}	Production d'oxygène par photosynthèse	$[\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}]$
$\text{prel}_{S,\text{max}}$	Taux de prélèvement maximal de substrat par les bactéries hétérotrophes	$[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}]$
q	Débit par unité de largeur	$[\text{L}^2\text{T}^{-1}]$
r_{NH_4}	Consommation d'ammoniaque par nitrification	$[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}]$
r_{NO_3}	Consommation de nitrates par dénitrification	$[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}]$
r_{O_2}	Consommation d'oxygène par respiration	$[\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}]$
$r_{\frac{C}{N}}$	Rapport ($\frac{C}{N}$) dans la matière organique	$[\text{MM}^{-1}]$
$r_{\frac{C}{P}}$	Rapport ($\frac{C}{P}$) dans la matière organique	$[\text{MM}^{-1}]$
C_R^*	Taux de catabolyse des produits de réserve	$[\text{T}^{-1}]$
D	Coefficient de diffusion moléculaire	$[\text{L}^2\text{T}^{-1}]$
E_{cte}	Taux d'excrétion de base	$[\text{T}^{-1}]$
E_{phot}	Constante d'excrétion liée à la photosynthèse	[sans dimension]
F	Biomasse des macromolécules fonctionnelles (protéines) du phytoplancton	$[\text{ML}^{-3}]$
HB	Biomasse totale des bactéries hétérotrophes	$[\text{ML}^{-3}]$
HY	Quantité de matière organique dissoute hydrolysée par unité de temps	$[\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}]$
HY_{max}	Taux d'hydrolyse maximal de la matière organique dissoute	$[\text{T}^{-1}]$
$I(z)$	Rayonnement photosynthétique actif à la profondeur z	$[\mu\text{E L}^{-2}\text{T}^{-1}]$
I_0	Rayonnement photosynthétique actif à la surface	$[\mu\text{E L}^{-2}\text{T}^{-1}]$
K_{denit}	Vitesse de dénitrification	$[\text{T}^{-1}]$
K_H	Constante de demi-saturation pour l'hydrolyse de la matière organique dissoute	$[\text{ML}^{-3}]$
K_M	Constante de demi-saturation vis à vis des petits métabolites (quota intracellulaire)	[sans dimension]
K_N	Constante de demi-saturation vis à vis de l'azote consommable par les PP	$[\text{ML}^{-3}]$
K_{NH_4}	Constante de demi-saturation vis à vis de l'ammoniaque 1) pour la nitrification 2) pour l'utilisation préférentielle de l'ammoniaque par le phytoplancton	$[\text{ML}^{-3}]$
K_{O_2}	Constante de demi-saturation vis à vis de l'oxygène	$[\text{ML}^{-3}]$

K_P	Constante de demi-saturation vis à vis du phosphore	[mol-P L ⁻³]
K_{rea}	Coefficient de réaération à l'interface air-eau	[T ⁻¹]
K_S	Constante de demi-saturation pour le prélèvement des substrats directs par les bactéries	[ML ⁻³]
M	Biomasse des précurseurs ou métabolites du phytoplancton	[ML ⁻³]
MOD	Matière organique dissoute	[ML ⁻³]
MOP	Matière organique particulaire	[ML ⁻³]
$Mort^*$	Taux de mortalité	[T ⁻¹]
N	Concentration totale en azote consommable par les algues	[ML ⁻³]
NB	Biomasse des bactéries nitrifiantes	[ML ⁻³]
NH_4^+	Concentration en ammoniacque	[ML ⁻³]
NO_3^-	Concentration en nitrates	[ML ⁻³]
O_2	Concentration en oxygène dissous	[ML ⁻³]
$[O_2]^{sat}$	Concentration d'oxygène à saturation	[ML ⁻¹]
P^*	Taux de production photosynthétique total sur la colonne d'eau	[T ⁻¹]
$P(z)^*$	Taux de production photosynthétique à la profondeur z	[T ⁻¹]
PO_4^{3-}	Concentration en orthophosphates	[ML ⁻³]
PP	Biomasse totale des producteurs primaires	[ML ⁻³]
P_{cons}	Phosphore total consommable par les algues	[ML ⁻³]
P_{max}^*	Taux de production photosynthétique maximal	[T ⁻¹]
Q_F	Quota cellulaire des macromolécules fonctionnelles	[sans dimension]
Q_R	Quota cellulaire des produits de réserve	[sans dimension]
Q_M	Quota cellulaire des précurseurs	[sans dimension]
R	Biomasse des produits de réserves (gucides, lipides) du phytoplancton	[ML ⁻³]
R_{tot}	Taux de respiration	[T ⁻¹]
R_M^*	Taux de respiration lié à la survie de la cellule	[T ⁻¹]
R_μ	Constante de respiration liée à la dépense énergétique de croissance	[sans dimension]
S	Substrats directs issus de l'hydrolyse exoenzymatique par les bactéries hétérotrophes	[ML ⁻³]
S_R^*	Taux de synthèse des produits de réserve	[T ⁻¹]
$S_{R,max}^*$	Taux de synthèse maximal des produits de réserve	[T ⁻¹]
T	Température de l'eau	[°C]
V_{sed}	Vitesse de sédimentation de l'espèce i	[LT ⁻¹]
Y	Rendement de croissance	[sans dimension]

Certains paramètres dépendent de la température de la façon suivante : $f(T) = f(T_{opt})e^{-\frac{(T-T_{opt})^2}{\sigma^2}}$, où T_{opt} représente la température optimale (maximum de f), et σ l'écart type de la fonction. * effet multiplicatif, ** division par $f(T)$.

TABLE C.3: Paramètres biologiques de RIVE.

C.3.1 Les producteurs primaires

La croissance des producteurs primaires suit la relation photosynthèse-irradiance suivante (Platt et al., 1977) :

$$P(z) = P_{max}(1 - e^{-\frac{\alpha I(z)}{P_{max}}})e^{-\frac{\beta I(z)}{P_{max}}}$$

L'irradiance suit la loi de Beer-Lambert : $I(z) = I_0 e^{-\eta z}$, où $\eta = \eta_{base} + \eta_{chla}[chla] + \eta_{mes}[mes]$. La prise en compte de la chlorophylle *a* (chl *a*) dans le calcul du coefficient d'extinction permet de représenter l'auto-ombrage. I_0 représente l'irradiance à la surface de l'eau pour les espèces de la colonne d'eau, ou l'irradiance au fond de la rivière pour les espèces périphytiques.

Chaque couche (eau ou périphytique) est distribuée verticalement pour le calcul d'un taux de photosynthèse moyen sur l'épaisseur de la couche $P_{moy} = \frac{1}{N} \sum_n P(z_n)$, où N représente le nombre de sous-couches. On suppose que les producteurs primaires périphytiques ne sont pas photoinhibés lorsqu'ils sont attachés par contre ils le sont lorsqu'ils sont en dérive dans la colonne d'eau (Hill and Boston, 1991).

Le comportement des producteurs primaires est représenté à l'aide du modèle AQUAPHY (Lancelot et al., 1991). Les protéines qui sont les macromolécules constitutives de la cellule F , les glucides et les lipides jouant le rôle de produits de réserve R , les acides aminés qui sont des petites molécules précurseurs de la synthèse des protéines S .

A tout moment la biomasse totale d'une espèce phytoplanctonique p est égale à la somme des constituants internes :

$$[PP]_p = [F]_p + [R]_p + [M]_p \quad (C.8)$$

Le carbone fixé dans la cellule par photosynthèse correspond à des petites molécules précurseurs devant être transformées, soit en protéines (croissance ou production nette), soit en produits de réserve.

Ces deux processus sont fonction du stock de précurseurs. Une fonction de MICHAELIS-MENTEN, dépendant du quota de précurseurs, est introduite :

$$S_R = S_{(R,max)} \frac{[Q_M]}{[Q_M] + K_M} \quad (C.9)$$

Des fonctions de limitation basées sur une fonction de Michaelis-Menten sont utilisées pour traduire la limitation de la croissance par les éléments nutritifs :

$$\mu_{PP} = \mu_{max} \left(\frac{[Q_M]}{[Q_M] + K_M} \right) \left(\frac{[N]}{[N] + K_N} \right) \left(\frac{[P_{cons}]}{[P_{cons}] + K_P} \right) \quad (C.10)$$

où $[N]$ et $[P]$ désignent les concentrations en azote et phosphore minéraux utilisables par les algues, $[N] = [NO_3^-] + [NH_4^+]$ et $[P_{cons}] = [PO_4^{3-}]$.

Le rapport de REDFIELD C/N/P = 106/16/1 (Redfield et al., 1963) est utilisé pour déterminer les éléments nutritifs présents dans la biomasse phytoplanctonique.

Les glucides et les lipides sont susceptibles d'être catabolysés pour produire des précurseurs et de l'énergie *via* la respiration. Une cinétique du premier ordre est utilisée pour représenter la catabolyse.

La respiration comprend deux termes, l'un assurant la survie de la cellule, l'autre correspondant à une dépense énergétique de croissance :

$$R_{\text{tot}} = R_M + R_\mu \mu \quad (\text{C.11})$$

Les termes de disparition autre que la sédimentation sont représentés sous la forme d'une cinétique du premier ordre traduisant la lyse d'origine virale ou bactérienne, ou le broutage. Un terme de broutage proportionnel à la biomasse phytoplanctonique est adopté. Les flux de sédimentation sont corrélés à la biomasse phytoplanctonique.

$$k_D = \frac{V_{\text{sed}}}{h} + \text{Mort} \quad (\text{C.12})$$

Les termes de disparition du phytoplancton s'appliquent à l'ensemble de la biomasse et sont répartis sur chacun des constituants F , R , M en fonction de leurs quotas respectifs Q_M , Q_F et Q_R .

C.3.2 Les bactéries hétérotrophes et la matière organique

Dans RIVE, les phases, particulaire et dissoute, de la matière organique sont distinguées. Les bactéries hétérotrophes consomment un type de matière organique dissoute, appelé substrat, qui est issu de l'hydrolyse de la matière organique dissoute biodégradable.

La transformation de la matière organique particulaire en matière dissoute est exprimée sous forme de cinétiques du premier ordre. Tous les termes de la classe particulaire sont soumis à la sédimentation. En plus des apports allochtones, introduits ponctuellement, il existe un terme de production autochtone correspondant à la mortalité des bactéries, du phytoplancton et du zooplancton.

L'hydrolyse exoenzymatique de la matière organique dissoute est liée à la biomasse bactérienne. Cette hydrolyse représente l'étape limitante de l'utilisation de la matière organique par les bactéries.

$$HY = -HY_{\text{max}} \frac{[MOD]}{[MOD] + K_H} (\Sigma_b [HB]_b) \quad (\text{C.13})$$

Le stock des substrats directs est alimenté par l'hydrolyse de la matière organique dissoute et l'excrétion algale. Ils constituent la fraction de matière organique dissoute directement assimilable par les bactéries. La croissance bactérienne est limitée par le stock de substrat :

$$\mu_{HB} = \mu_{\text{max}, HB} \frac{[S]}{[S] + K_S} \quad (\text{C.14})$$

Le stock de substrat prélevé par la croissance des bactéries hétérotrophes est estimé à l'aide du rendement de la croissance bactérienne.

C.3.3 Les bactéries nitrifiantes

L'activité des bactéries nitrifiantes est liée à la concentration en ammoniacque. La limitation de la croissance des bactéries nitrifiantes par l'ammoniacque est prise en compte au moyen d'une loi de Michaelis-Menten. La réaction est inhibée par des faibles concentrations en oxygène.

$$\mu_{NB} = \mu_{\max} \left(\frac{[NH_4]}{[NH_4] + K_{NH_4}} \right) \left(\frac{[O_2]}{[O_2] + K_{O_2}} \right) \quad (C.15)$$

C.3.4 L'ammoniaque

Outre l'activité de nitrification, le prélèvement par le phytoplancton est également une source de transformation de l'ammoniaque dans le milieu. Une relation de Michaelis-Menten permet de rendre compte de l'utilisation préférentielle de l'ammoniaque par le phytoplancton. La dégradation de la matière organique par les bactéries hétérotrophes se traduit par une restitution de l'azote ammoniacal au milieu.

C.3.5 Les nitrates

Les nitrates sont produits lors de la nitrification, et prélevés par le phytoplancton lorsque la concentration en ammoniaque n'est plus suffisante. En cas d'anoxie, la dénitrification conduit à une élimination des nitrates du milieu sous forme de N_2 . Le terme de dénitrification est calculé à partir d'un bilan sur l'oxygène :

$$\begin{cases} \text{si } O_2^n + \Delta O_2 > 0, & r_{NO_3} = 0 \\ \text{si } O_2^n + \Delta O_2 < 0, & r_{NH_4} = 0 \\ & r_{NO_3} = O_2 + \Delta O_2 \\ & O_2^{n+1} = 0 \end{cases}$$

ΔO_2 représente la quantité d'oxygène dissous produite par photosynthèse et consommée par respiration hétérotrophe et autotrophe pendant le pas de temps de calcul. La première condition traduit le fait que l'oxygène produit au court du pas de temps et celui présent dans la colonne d'eau au début du pas de temps est suffisant pour assurer la demande en oxygène pour la respiration bactérienne. Il n'y a alors pas de dénitrification. Dans le second cas, la nitrification est inhibée et la quantité de nitrates consommée est égale à la quantité d'oxygène manquant pour assurer la dégradation de la matière organique.

C.3.6 Le phosphore

La reminéralisation du phosphore par les bactéries a lieu lors de la phase d'hydrolyse (Shan et al., 1994). Il y a donc restitution rapide et complète au milieu du phosphore organique dissous sous forme minérale. Les bactéries hétérotrophes prélèvent directement le phosphore sous forme minérale pour assurer leurs besoins de croissance (Cotner and Wetzel, 1992).

Le phénomène d'adsorption des orthophosphates a été introduit dans une version récente de PROSE (Vilmin et al., 2012a). Le phosphore dissous peut être adsorbé sur la matière en suspension minérale pour donner du phosphore inorganique particulaire. Il ne peut dans ce cas plus être prélevé pour les besoins de croissance des organismes vivants. L'adsorption suit une loi de Michaelis-Menten, amortie par un coefficient d'amortissement numérique qui est fonction du pas de temps pour éviter les oscillations de la quantité de phosphore dissous dans le milieu. Tout d'abord, la quantité de phosphore inorganique particulaire potentielle est calculée à partir de la quantité de phosphore sous forme d'orthophosphates et de la quantité de matière en suspension à l'instant t :

$$[PIP_{\text{pot}}]^t = [MES]^t \cdot P_{\text{ac}} \cdot \frac{[PO_4^{3-}]^t}{[PO_4^{3-}]^t + K_{\text{ps}}} \quad (\text{C.16})$$

P_{ac} et K_{ps} sont considérés constants et doivent être définis par l'utilisateur. La différence $\delta_{PIP} = [PIP_{\text{pot}}]^t - [PIP]^t$ est ensuite calculée.

- Si $\delta_{PIP} > 0$:
 - si $\delta_{PIP} > [PO_4^{3-}]^t$, $\delta'_{PIP} = PO_4^{3-t}$,
 - si $\delta_{PIP} < [PO_4^{3-}]^t$, $\delta'_{PIP} = \delta_{PIP}$.
 - Si $\delta_{PIP} < 0$, il y a désorption de phosphore sous forme d'orthophosphate : $\delta'_{PIP} = \delta_{PIP}$.
- Dans les deux cas, la concentration en orthophosphates à l'instant $t + dt$ est :

$$[PO_4^{3-}]^{t+dt} = [PO_4^{3-}]^t - \delta'_{PIP} \cdot \frac{dt}{dt + K_{dt}} \quad (\text{C.17})$$

Le coefficient d'amortissement numérique K_{dt} est défini par l'utilisateur en fonction de l'amortissement souhaité. Si $K_{dt} = dt$, l'échange sera réduit de moitié par rapport à l'échange non amorti⁴.

Les paramètres employés sont ceux proposés par [Billen et al. \(2007a\)](#) :

- $P_{\text{ac}} = 5,5 \text{ mgP/gMES}$,
- $K_{\text{ps}} = 0,7 \text{ mgP/L}$.

C.3.7 L'oxygène

L'oxygène est une variable clé du fonctionnement de l'écosystème. La variation de cette variable intègre simultanément les respirations des différents organismes et l'activité photosynthétique. De plus, dans la colonne d'eau, un terme de réoxygénation aux barrages est introduit dans PROSE, ainsi qu'une diffusion à l'interface eau-air :

$$\begin{aligned} \frac{d[O_2]}{dt} = & pO_2 - r_{(O_2, \text{phy})} - r_{(O_2, \text{HB})} - r_{(O_2, \text{NB})} \\ & + K_{\text{rea}}([O_2]^{\text{sat}}(T) - [O_2]) + [O_2]_{\text{barrage}} \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

$$pO_2 = \sum_i P_i[F]_i \quad (\text{C.19})$$

$$r_{(O_2, \text{phy})} = \tau_{\text{phy}} \sum_i R_i[F]_i \quad (\text{C.20})$$

$$r_{(O_2, \text{HB})} = \tau_{\text{HB}} \sum_i (1 - Y_i) \text{prel}_{S,i}[HB]_i \quad (\text{C.21})$$

$$r_{(O_2, \text{NB})} = \tau_{\text{NB}} \sum_i \frac{\mu_i}{Y_i} [NB]_i \quad (\text{C.22})$$

$[O_2]_{\text{barrage}}$ est un terme de réoxygénation au barrage. Il concerne les mailles situées immédiatement en aval des ouvrages.

L'équation adoptée pour la réaération à la surface est la suivante :

4. Lorsque $K_{dt} = 0$, de fortes oscillations numériques peuvent apparaître

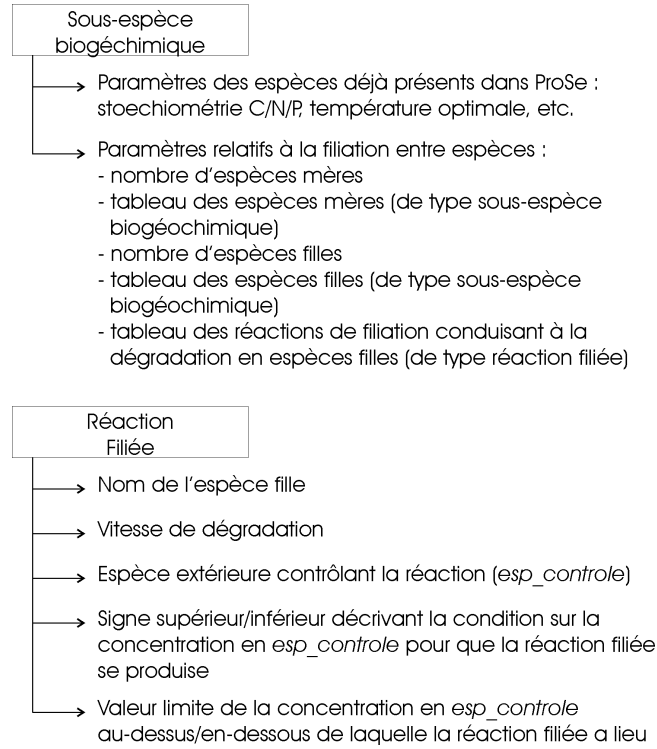


FIGURE C.3: Structures permettant la modélisation des filiations entre espèces dans PROSE. D'après [Vilmin \(2011\)](#).

$$\frac{\partial [O_2]}{\partial t}_{\text{rea}} = K_{\text{rea}}([O_2]^{\text{sat}}(T) - [O_2]) \quad (\text{C.23})$$

K_{rea} résulte de la diffusion turbulente et de l'action du vent à la surface.

La concentration en oxygène dissous à saturation est fonction de la température de l'eau, qui est une variable de forçage de PROSE :

$$[O_2]^{\text{sat}}(T) = \frac{475}{33,5 + T} \quad (\text{C.24})$$

La réoxygénation aux barrages s'exprime différemment suivant que l'écoulement est noyé ou dénoyé. PROSE prend en compte ces deux mécanismes en utilisant, la formulation de Holler en dénoyé, et de Avery et Novack en noyé ([Even, 1995](#)).

C.3.8 La notion de filiations

De nombreuses espèces polluantes appartiennent à des familles d'espèces et font partie de chaînes de dégradation. C'est par exemple le cas des pesticides et des alkylphénols. C'est pourquoi le principe de filiation a été intégré au modèle PROSE ([Vilmin, 2011](#)). Il est possible de représenter aussi bien les dégradations d'espèces donnant jour à plusieurs espèces filles ou encore des cycles de réactions.

Pour pouvoir modéliser la filiation entre espèces, plusieurs structures du modèle ont été modifiées ou ajoutées. De nouveaux attributs ont été donnés aux sous-espèces biogéochimiques et une structure «reaction_filiee» a été ajoutée. Ces modifications sont résumées dans la Figure C.3.8.

La dégradation des espèces est représentée par une cinétique d'ordre un et peut être contrôlée par la concentration d'une espèce extérieure. Par exemple, des conditions d'anoxie peuvent être imposées. L'équation donnant la concentration d'une espèce filiée à l'instant t est la suivante :

$$\frac{dC_{\text{esp}}}{dt} = \sum_i K_{\text{d, mere}_i \rightarrow \text{esp}} \cdot C_{\text{mere}_i} - \sum_j K_{\text{d, esp} \rightarrow \text{filie}_j} \cdot C_{\text{esp}} \quad (\text{C.25})$$

C_{esp} et C_{mere_i} sont respectivement les concentrations de l'espèce filiée et de sa $i^{\text{ème}}$ espèce mère ; $K_{\text{d, mere}_i \rightarrow \text{esp}}$ et $K_{\text{d, esp} \rightarrow \text{filie}_j}$ correspondent aux cinétiques de réactions de la $i^{\text{ème}}$ espèce mère vers l'espèce filiée et de l'espèce filiée vers sa $j^{\text{ème}}$ espèce fille.

C.4 Echanges colonne d'eau-benthos

Une des spécificités de PROSE est d'inclure le compartiment périphyton qui, en plus des sédiments, échange de manière spécifique avec la colonne d'eau (Flipo et al., 2004, 2007c).

Les variables des échanges dans ProSe		
$a(p_q)$	Arrachage horaire correspondant à p_q	$[\text{T}^{-1}]$
g	Constante universelle de gravité	$[\text{LT}^{-2}]$
h	Hauteur d'eau	$[\text{L}]$
k_i	Coefficient d'arrachage de la variable i , varie entre 0 et 1	[sans dim]
n	Coefficient empirique	[sans dim]
p_c	Pente critique de l'hydrogramme ; si $p_q > p_c$, il y a arrachage	$[\text{L}^3\text{T}^{-2}]$
p_q	Pente instantannée de l'hydrogramme	$[\text{L}^3\text{T}^{-2}]$
ret	Coefficient de rétention de la matrice périphytique	[sans dim]
u_*	Vitesse de cisaillement	$[\text{LT}^{-1}]$
$A(p_c)$	Coefficient d'arrachage correspondant à une pente p_c	[sans dim]
B_e	Biomasse périphytique comprenant les espèces propres au périphyton	$[\text{M}]$
B_i	Biomasse de l'espèce i	$[\text{M}]$
B_w	Biomasse périphytique comprenant les espèces sédimentées propres à la colonne d'eau	$[\text{M}]$
C_b	Concentration dans le périphyton	$[\text{ML}^{-3}]$
C_w	Concentration dans la colonne d'eau	$[\text{ML}^{-3}]$
D	Coefficient de diffusion moléculaire	$[\text{L}^2\text{T}^{-1}]$
D_t	Coefficient de diffusion turbulente	$[\text{L}^2\text{T}^{-1}]$
E_s	γS_c^n	[sans dim]
J	Pente de frottement	[sans dim]
P_{flow}	Puissance hydraulique turbulente volumique dissipée par l'écoulement	$[\text{ML}^{-1}\text{T}^{-3}]$
P_{hyd}	Puissance hydraulique turbulente volumique dissipée par l'écoulement naturel	$[\text{ML}^{-1}\text{T}^{-3}]$

P_{navig}	Puissance hydraulique volumique liée à la navigation exprimée par unité de surface	$[ML^{-2}T^{-1}]$
P_{sed}	Puissance dissipée par le processus de sédimentation	$[ML^{-1}T^{-3}]$
Q_{base}	Débit de base de l'écoulement	$[L^3T^{-1}]$
Q_{max}	Débit de la pointe de crue	$[L^3T^{-1}]$
S_c	Nombre de Schmidt, $S_c = \frac{\nu}{D}$	[sans dim]
R_H	Rayon hydraulique	[L]
T_a	Durée de l'arrachage effectif du périphyton	[T]
T_c	Temps de passage d'une crue	[T]
U	Vitesse moyenne de l'eau	$[LT^{-1}]$
$V_{sed,i}$	Vitesse de sédimentation de l'espèce i	$[LT^{-1}]$
X_i	Concentration de l'espèce i	$[ML^{-3}]$
β	Coefficient de transfert de masse	$[MT^{-1}]$
η	Fraction de la puissance hydraulique dissipée servant à maintenir les particules en suspension (théorie de la capacité de transport)	[sans dim]
γ	Coefficient empirique	[sans dim]
ϕ_d	Flux diffusif par unité de surface	$[ML^{-2}T^{-1}]$
ϕ_{ero}	Flux érosif maximal par unité de surface	$[ML^{-2}T^{-1}]$
$\phi_{sed,i}$	Flux sédimentaire de l'espèce i	$[LT^{-2}T^{-1}]$
ν	Viscosité cinématique	$[L^2T^{-1}]$
ρ	Masse volumique	$[ML^{-3}]$
ρ_i	Masse volumique de l'espèce i	$[ML^{-3}]$
ρ_w	Masse volumique de l'eau	$[ML^{-3}]$
τ	Contrainte de cisaillement	$[ML^{-1}T^{-3}]$
χ_i	Fraction massique de l'espèce i	[sans dim]

TABLE C.4: Notations utilisées pour les échanges eau-benthos de PROSE.

C.4.1 Echanges de la phase dissoute

Les échanges dissous entre la colonne d'eau et les deux compartiments benthiques se font par diffusion turbulente dans la couche limite. Pour une espèce i , le flux diffusif à l'interface eau-sédiment est calculé par la relation (Boudreau, 1997) :

$$\phi_i = \beta_i(C_b - C_w) \quad (C.26)$$

β est le coefficient de transfert de masse exprimé par $\beta_i = u_* \gamma S_c^n$ (Boudreau, 1997). β est équivalent à un coefficient de diffusion (D) divisé par une distance de diffusion.

Le nombre de Schmidt, S_c correspond au rapport de la viscosité cinématique ν sur le coefficient de diffusion D. Pour les eaux de surface, le nombre de Schmidt vaut environ 1000 (Boudreau, 1997).

La formulation $\beta = E_s u_*$ est retenue pour PROSE. Par définition, u_* vaut $u_* = \sqrt{\left(\frac{\tau}{\rho}\right)}$. En exprimant la contrainte de cisaillement à l'aide de variables moyennées, on obtient⁵ $u_* = \sqrt{ghJ}$.

5. On peut approximer u_* par $\sqrt{gR_H J}$.

C.4.2 Echanges particuliers

Les échanges particuliers se fondent sur la théorie d'une sédimentation et d'une érosion simultanée sur un pas de temps et à l'échelle d'une *maille*. Pour chaque espèce, un flux sédimentaire est calculé à chaque pas de temps :

$$\phi_{sed,i} = V_{sed,i} X_i \quad (C.27)$$

Le flux de sédiments provenant de la colonne d'eau, et qui se dépose sur le fond des cours d'eau, est réparti entre deux compartiments (sédiments et périphyton) au moyen du taux de recouvrement du fond de la rivière par le périphyton. Ce taux a été estimé pour le Grand Morin à 30 %. Ce taux par défaut peut être spécifié maille par maille si nécessaire.

C.4.2.1 Sédimentation, érosion

Le mode d'échange entre le benthos et la colonne d'eau diffère suivant le compartiment d'origine des particules. Les échanges entre les sédiments et la colonne d'eau correspondent à un processus d'érosion qui dépend de la puissance hydraulique de l'écoulement et de l'énergie fournie par la navigation.

La capacité érosive de l'écoulement est déterminée à l'aide de la théorie de la capacité de transport (Bagnold, 1966; Celik and Rodi, 1991; Prosser and Rustomji, 2000; Tayfur, 2002; Yang, 1996) et s'exprime dans PROSE en considérant qu'une fraction (η) de la puissance hydraulique totale, dissipée par l'écoulement par unité de volume (P_{flow} [ML⁻¹T⁻³]), est utilisée pour maintenir les particules en suspension. Mathématiquement, cette théorie s'exprime par l'égalité :

$$\eta P_{flow} = P_{sed} \quad (C.28)$$

où η est la fraction de l'énergie dissipée utilisée pour maintenir les particules en suspension, et P_{sed} est la puissance dissipée par la sédimentation. Nous allons donc maintenant écrire les deux termes du bilan pour faire apparaître les variables d'état du modèle, l'objectif étant de calculer un flux érosif maximal correspondant à la capacité de transport de l'écoulement.

La puissance dissipée par l'écoulement, P_{flow} , comprend deux termes : une puissance hydraulique de l'écoulement naturel (P_{hyd} [ML⁻¹T⁻³]), et une puissance liée à l'anthropisation du milieu par la navigation (P_{anthro} [ML⁻¹T⁻³]), soit : $P_{flow} = P_{hyd} + P_{anthro}$.

Les développements de Celik and Rodi (1991) permettent d'exprimer la puissance hydraulique de l'écoulement naturel par $P_{hyd} = \rho g J U$, où J est la pente d'énergie de l'écoulement.

Le membre de gauche de l'équation C.28 s'écrit donc $\eta(\rho g J U + P_{anthro})$.

Intéressons nous maintenant au second membre. Dans un repère vertical, la somme des forces s'appliquant à N classes de particules (de différents types i) en chute dans un volume fluide V de densité ρ , correspond à la somme des forces de la pesanteur sur ces particules $\sum_i X_i V \vec{g}$ contre-balançée par la poussée d'Archimède $\sum_i \frac{X_i V}{\rho_i} \rho \vec{g}$.

La dérivée temporelle du travail de ces forces sur une distance de chute $d\vec{l}_i$ définit la puissance dissipée par la chute des particules, que l'on ramène par unité de volume en la divisant par le volume V , soit :

$$P_{sed} = \sum_i X_i \left[1 - \frac{\rho}{\rho_i} \right] g \frac{dl_i}{dt} \quad (C.29)$$

On identifie très facilement $V_{sed,i}$ comme étant $\frac{dl_i}{dt}$.

Le flux érosif total s'écrit comme étant la somme des flux de particules i érodées, soit $\phi_{ero} = \sum_i \phi_{ero,i}$.

On pose l'hypothèse de **proportionnalité des flux sédimentaires**. En définissant la fraction massique de la classe particulaire i par $\chi_i = \frac{\rho_i}{\sum_i \rho_i}$, on écrit alors $\phi_{ero,i} = \chi_i \phi_{ero}$. Or $\phi_{ero,i} = X_i V_{sed,i}$, d'où $X_i V_{sed,i} = \chi_i \phi_{ero}$. L'équation C.29 s'écrit donc :

$$P_{sed} = \left[\sum_i \frac{\rho_i - \rho}{\rho_i} \chi_i \right] g \phi_{ero} \quad (C.30)$$

On peut alors re-écrire l'équation C.28 comme suit :

$$\left[\sum_i \frac{\rho_i - \rho}{\rho_i} \chi_i \right] g \phi_{ero} = \eta [\rho g J U + P_{anthro}] \quad (C.31)$$

Finalement, en posant $\zeta = \frac{1}{\sum_i \chi_i \frac{\rho_i - \rho}{\rho_i}}$, on obtient ainsi le flux maximum d'érosion correspondant à la capacité de transport par la formule :

$$\phi_{ero} = \eta \frac{\zeta}{g} [\rho g J U + P_{anthro}] \quad (C.32)$$

Pour simplifier la paramétrisation de la puissance dissipée par la navigation, on exprime alors $P_{navig} = \frac{P_{anthro}}{g}$ qui correspond à un flux de particules érodées [$\text{MT}^{-1}\text{L}^{-2}$], soit la formulation finale du flux total érodé :

$$\phi_{ero} = \zeta \eta [\rho J U + P_{navig}] \quad (C.33)$$

η [-] et P_{navig} [$\text{MT}^{-1}\text{L}^{-2}$] sont considérés constants et constituent des paramètres d'entrée du modèle. À chaque pas de temps, le stock de sédiments présents au fond des rivières est érodé à hauteur maximale de ϕ_{ero} .

C.4.2.2 Les pertes du périphyton en régime hydraulique stable

Les échanges entre la colonne d'eau et le périphyton sont représentés, en période de débit stable, à la fois par des pertes permanentes et une érosion similaire à celle exprimée au paragraphe précédent. Les pertes permanentes sont de 0.01 j^{-1} (DeAngelis et al., 1995; Dent and Henry, 1999). Le compartiment d'origine des particules (colonne d'eau ou périphyton) est pris en compte pour modéliser les échanges. En effet, les espèces périphytiques (producteurs primaires attachés, espèces bactériennes représentatives du périphyton) ne sont soumises qu'à des pertes permanentes. Par contre pour les espèces originaires de la colonne d'eau (comme le phytoplancton par exemple), un coefficient de rétention (*ret*) est défini. Ce paramètre représente la capacité du périphyton à retenir les particules sédimentées. En considérant que B_w est la biomasse périphytique originaire de la colonne d'eau, les pertes permanentes s'appliquent à $ret \times B_w$ et le processus d'érosion est appliqué à $(1 - ret) \times B_w$.

C.4.2.3 L'arrachage

Lors d'une crue l'accroissement de la vitesse de l'eau provoque un arrachage du périphyton. Après l'évènement, la biomasse peut être totalement érodée (Uehlinger et al., 1996). Nous proposons le schéma conceptuel présenté à la Figure C.4 pour rendre compte du processus physique d'arrachage.

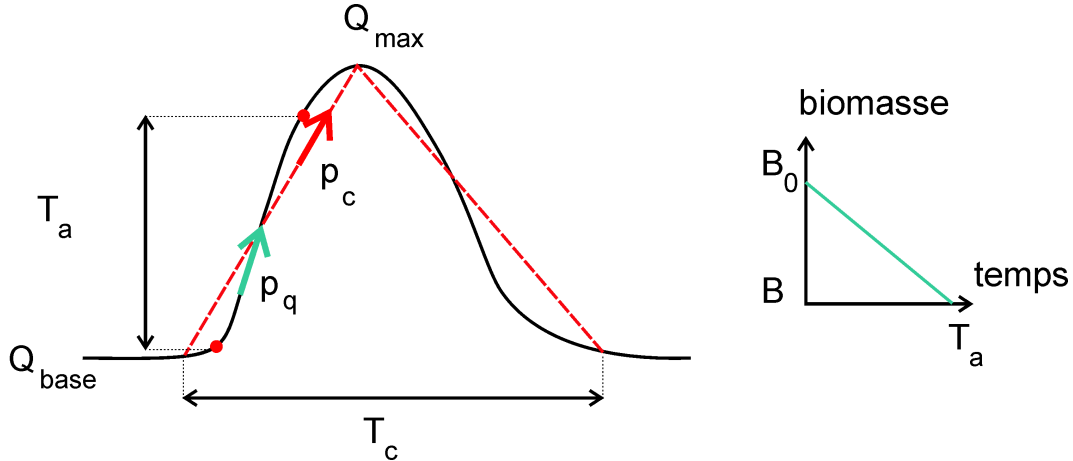


FIGURE C.4: Utilisation d'un hydrogramme pour caractériser l'arrachage. À gauche, réduction de l'hydrogramme réel (noir) en un hydrogramme idéalisé (pointillés rouges). À droite, schéma idéalisé de réduction de la biomasse lors d'une crue. T_c est le temps de passage de la crue, T_a le temps d'arrachage, p_c la pente critique au dessus de laquelle il y a effectivement arrachage, p_q la pente réelle sur un pas de temps ΔT . D'après Flipo et al. (2004).

Biggs and Close (1989) ont déterminé une relation entre l'intensité d'une crue, représentée par le rapport du débit de la pointe de crue sur le débit de base ($\frac{Q_{max}}{Q_{base}}$), et le pourcentage total de biomasse arrachée pendant toute la durée de l'évènement extrême. Dans la démarche que nous allons détailler dans la suite, nous considérerons que Q_{base} correspond au débit d'étiage. La pente d'augmentation du débit (p_q) est une variable plus pertinente, pour la modélisation, que la valeur du débit de pointe (Fig. C.4). En reliant l'arrachage à la pente d'augmentation du débit, il est alors possible d'estimer l'arrachage à chaque pas de temps de calcul sans connaître *a priori* l'intensité de la crue. Cette démarche n'est valable que si l'augmentation de la pente de débit est corrélée à l'intensité de la crue. Cette hypothèse semble cohérente avec la problématique des petits bassins versants qui sont *a priori* très réactifs.

La détermination de la loi d'arrachage en fonction de la pente d'augmentation du débit a été effectuée par une analyse des hydrogrammes de plusieurs événements pluvieux. Pour chaque événement, on détermine un couple arrachage, pente de débit ($a(p), p$), où $a(p)$ est en h^{-1} , p en $(m^3.s^{-1}).j^{-1}$. L'interpolation de tous ces couples donne ensuite la loi d'arrachage (Flipo et al., 2004). Pour un événement donné, on définit une pente critique de l'hydrogramme $p_c = 2 \frac{Q_{max} - Q_{base}}{T_c}$, où T_c correspond au temps de passage de la crue (Figure C.4). Cette pente fût déterminée sur le Grand Morin pour les crues observées au cours des étiages de 2000 et 2001. Ces pentes ont ensuite été reliées aux quantifications de Biggs and Close (1989) en considérant les intensités des événements.

D'après Biggs and Close (1989), à p_c correspond une réduction totale de la biomasse lors

du passage de la crue de $A(p_c)$ %. On estime que, pour des intensités de crue variant entre 0 et 3, $A(p_c)$ est nul, et que, pour des intensités variant entre 3 et 7, $A(p_c)$ varie linéairement de 0 à 50 %. On admet aussi une variation linéaire de 50 à 95 % pour des intensités variant entre 7 et 25. Par contre, au dessus d'une intensité de 25, on considère l'arrachage permanent à 95 % de la biomasse fixée.

Pour la modélisation de l'arrachage lors d'une crue, on admet qu'il n'y a arrachage que si la pente instantanée d'augmentation du débit (p_q) est supérieure à la pente critique de l'hydrogramme. L'analyse de l'hydrogramme de crue (Fig. C.4) montre que le temps d'arrachage effectif T_a est largement inférieur à $\frac{T_c}{2}$. En effet, en début de crue et à la pointe de crue, la pente instantanée d'augmentation du débit est plus faible que la pente critique de l'hydrogramme. On peut donc admettre que le temps caractéristique d'arrachage effectif est fonction de la pente critique de l'hydrogramme. Le taux maximum d'arrachage peut alors être exprimé à l'aide de la relation $a(p_c) = \frac{A(p_c)}{100T_a(p_c)}$. $a(p_c)$ s'exprime en h^{-1} . Cette loi d'arrachage a été déterminée sur le Grand Morin (Flipo et al., 2004).

On admet que tous les éléments composant le périphyton ne sont pas arrachés aussi facilement. On introduit donc un paramètre k_i qui caractérise l'arrachage de la variable i . Ce paramètre varie entre 0 et 1. $a(p_c)$ doit donc être pondéré par k_i afin de représenter l'arrachage relatif à l'espèce i . Pour une espèce donnée, les pertes instantanées par arrachage sont égales à la réduction instantanée de sa biomasse. L'évolution de la biomasse fixée de l'espèce i (B_i) est alors égale à :

$$\frac{\partial B_i}{\partial t} = -k_i a(p_q) B_i \quad (C.34)$$

C.4.3 Résolution des équations biologiques

Les équations relatives à la biologie sont résolues, soit avec une méthode explicite, soit par la méthode de Runge-Kutta. La résolution de l'équation générale d'advection-dispersion-biologie étant dans notre cas résolue de manière découplée, la concentration utilisée au début d'un pas de temps biologique correspond à la concentration à l'issue du transport par advection et dispersion.

Annexe D

Sélection d'articles publiés ou soumis

- D.1 [Flipo et al. \(2012\)](#) Hybrid fitting of a hydrosystem model : long term insight into the beauce aquifer functioning (France). Water Resour. Res. 48, W05509

Hybrid fitting of a hydrosystem model: Long-term insight into the Beauce aquifer functioning (France)

N. Flipo,¹ C. Monteil,^{1,2} M. Poulin,¹ C. de Fouquet,¹ and M. Krimissa²

Received 25 June 2011; revised 29 February 2012; accepted 12 March 2012; published 5 May 2012.

[1] This study aims at analyzing the water budget of the unconfined Beauce aquifer (8000 km²) over a 35 year period, by modeling the hydrological functioning and quantifying exchanged water fluxes inside the system. A distributed process-based model (DPBM) is implemented to model the surface, the unsaturated zone and the aquifer subsystems. Based on an extensive literature review on multiparameter optimization and inverse problem, a pragmatic hybrid fitting method that couples manual and automatic calibration is developed. Three data subsets are used for calibration (10 year), validation (10 year) and test (35 year). The global piezometric head root-mean-square error is around 2.5 m for the three subsets and is rather uniformly spatially distributed over 78 piezometers. The sensitivity of the simulation to the different steps of the calibration process is investigated. The transmissivity field permits the fitting of the low-frequency signal for long-term filtering of the recharge signal, whereas the storage coefficient filters the signal with a higher frequency. For long-term insight into aquifer system functioning, the priority is thus to first fit the transmissivity field and to assess the distributed aquifer recharge accurately. The fitted DPBM, coupled with a linear model of coregionalization, is then used to quantify the hydrosystem water mass balance between 1974 and 2009, indicating that there is yet no trend of water resources decrease neither due to climate nor to human activities.

Citation: Flipo, N., C. Monteil, M. Poulin, C. de Fouquet, and M. Krimissa (2012), Hybrid fitting of a hydrosystem model: Long-term insight into the Beauce aquifer functioning (France), *Water Resour. Res.*, 48, W05509, doi:10.1029/2011WR011092.

1. Introduction

[2] Managing Water Resources in a sustainable way is one of the, if not the, main challenge that human societies will face in the near future. The evolution of the climate will impact the Water Cycle. Thus, a better understanding of the hydrosystem functioning is necessary for providing water and food to the rapidly growing human population. Today, human societies use around 2000 km³ yr⁻¹ distributed in 3%, 5% and 92% for domestic, industrial and agricultural consumptions, respectively [de Marsily, 2008]. It is estimated that water withdrawals will increase by 25% until 2050 [de Marsily, 2008]. These estimates are global assessments and involve the hydrosystem Earth itself, which is an open system at the space-atmosphere interface.

[3] To refine these estimates at the basin scale, one needs to introduce the continental hydrosystem concept. As defined by Kurtulus *et al.* [2011, p. 265] a continental “hydrosystem is defined as a part of space [where the atmosphere overlaps the soil surface and subsurface] through which water flows. Physical and biogeochemical phenomena occur in all hydrosystems because of reactions due to water moving through a medium.” That said, it first appears that continental hydrosystems are always open systems for which

boundary conditions have to be defined. Usually open boundary conditions are the water fluxes at the surface-atmosphere interface and, for sedimentary basin, ground-water fluxes at a larger scale. The only closed boundary is usually the surface boundary, which is, in the absence of karst, relatively easy to define using Geographical Information System (GIS) and Digital Elevation Models (DEMs). The concept of hydrosystem involves two interconnected components: storage components where water flows slowly (e.g., aquifers) and conductive components where large quantities of water flow relatively quickly (e.g., surface water). Modeling hydrosystems therefore involves coupling these two contrasting components either through exchanged fluxes at each interface [Delfs *et al.*, 2009; Flipo *et al.*, 2007a; Kolditz *et al.*, 2008; Nalbantis *et al.*, 2011] (for instance the Darcy law for the surface/subsurface water) or through the continuity of a physically continuous state variable, such as the water pressure [Kollet and Maxwell, 2006; Panday and Huyakorn, 2004; Therrien *et al.*, 2010; VanderKwaak and Loague, 2001; Weill *et al.*, 2009].

[4] The scope of this paper is to understand the Beauce hydrosystem functioning, which is an important water resource mostly used for irrigation and drinking water supply. First a review of methods for fitting coupled surface water/groundwater models is presented. Then, the available data and model used to simulate surface and groundwater flows are described. A hybrid fitting methodology is developed, which couples a trial-and-error approach relying on expert knowledge with an automated inversion technique for the aquifer subsystem. Finally, the fitting results and a

¹Geosciences Department, MINES ParisTech, Fontainebleau, France.

²Laboratoire National d’Hydraulique et Environnement, EDF R&D, Chatou, France.

sensitivity analysis of the method are presented. Three aspects are investigated: the sensitivity to storage coefficient field, the sensitivity to transmissivity field, and the sensitivity of the inversion process to recharge estimate. Finally, the calibrated model is used to calculate a water mass balance of the Beauce hydrosystem over 35 years.

1.1. Hydrosystem Modeling and Uncertainties

[5] Throughout decades, hydrosystems have been studied using thousands of computer models either empirical/conceptual and/or stochastic/process based [Loague and VanderKwaak, 2004]. The first distributed physically based models of sedimentary basin were developed in the 1970s and 1980s based on finite difference schemes [Abbott et al., 1986a, 1986b; de Marsily et al., 1978; Deschesnes et al., 1985; Girard et al., 1980; Ledoux et al., 1989]. In these types of models, the hydrosystem is divided into components that exchange through interfaces. Initially the exchanges through the surface-subsurface interfaces, mainly the ground surface itself and the stream-aquifer interface, have been simulated given a resistant model, which considers a conductive medium. In the last decade, new approaches following Freeze [1971] pioneering contributions have been developed that couple overland and subsurface flows by means of pressure head [Kollet and Maxwell, 2006; Panday and Huyakorn, 2004; VanderKwaak and Loague, 2001; Weill et al., 2009]. But apart from Lemieux and Sudicky [2010], who worked on a coarse grid, these models are still time consuming for simulating large basins ($>10,000 \text{ km}^2$) over a long period of time [Ebel and Loague, 2006; Goderniaux et al., 2009; Li et al., 2008; Mirus et al., 2007, 2009; VanderKwaak and Loague, 2001]. For more information on how to couple surface and subsurface models, see for instance Ebel et al. [2009] and Furman [2008].

[6] Even though Hunt et al. [2007] argue for an increasing use of distributed process-based models (DPBM), their main problem is summarized by the equifinality concept [Beven, 1989]. The equifinality is, in the most general sense, the case where quite different processes produce a similar effect [Ebel and Loague, 2006]. As measurements are scarcely available, it is not possible to mathematically close the system of equations that describes the behavior of the system. Thus, not all unknowns can be identified. Regarding this, Beven [2006, p. 3141] states that “there are different philosophies about how to estimate uncertainties and take into account input, measurement and model structural error. These will be difficult to resolve in the near future because we do not actually have the data to properly test the different methodologies”. Further on “it is simply not possible to evaluate the statistical characteristics of input data errors or parameter estimation errors” [Beven, 2006, p. 3141]. Schellart et al. [2010, p. 3893] also confirm that “any solutions designed using modeling approaches that do not consider uncertainty associated with model inputs and model parameters may be significantly overdimensioned or underdimensioned.” Finally, Efstratiadis et al. [2008, p. 990] conclude that “it is impossible to detect a global optimal model structure or a “global” optimal parameter set, which definitely better reproduce the entire hydrological regime of a river basin.”

[7] Another point of view to tackle the problem was introduced by de Marsily [1994, p. 220] arguing that for gauged basins, “most [...] models currently used in hydrology on

series of observed data are actually quite similar. They may be called deterministic or even stochastic, conceptual or distributed but the basic principle of all these “fitted” models is the same: the “engine” in the box is created by the data set and its exact nature is irrelevant.” This perspective on hydrosystem model fitting is confirmed by Loague and VanderKwaak [2004], who highlight the fact that modelers are usually short of data that enable the understanding of the system’s functioning, albeit they would prefer to use physics-based models, for which most of the parameter values can be obtained experimentally. Recently few advances have been made to improve the data usage, introducing geostatistics for understanding model uncertainties limited to either process description or input data assessment [Flipo et al., 2007b; Polus et al., 2011]. In hydrology the theoretical framework and the computing tools still need to be developed for using these techniques at a large scale over a long period of time.

1.2. Fitting Methodologies

[8] With regard to the fitting methodologies many improvements have been achieved in the last decade. It is now recognized that, for DPBM, multiobjective calibration is needed to better assess model internal errors, model uncertainties and to identify several parameter sets enabling the simulation of the hydrological response in agreement with natural properties of the hydrosystem [Anderton et al., 2002a, 2002b; Efstratiadis et al., 2008; Efstratiadis and Koutsoyiannis, 2010; Gill et al., 2006; Gupta et al., 1998; Khu et al., 2008; Madsen, 2003; Shrestha and Rode, 2008]. Switching from a mono-objective to a multiobjective calibration improved the quality of uncertainty assessment within models, but discussions between scientists and water managers still need to step forward especially for the definition of the criteria or the objective functions themselves [Refsgaard and Henriksen, 2004]. Another question is the predictability of models, which can only be tested on real case studies. This question is addressed during a second step in the fitting process by running the model with conditions independent from the ones used for calibration, usually with a different period of time. This step is called validation [Refsgaard and Henriksen, 2004] and is historically based on split samples [Refsgaard, 1997], aiming at avoiding over-fitting issues during the calibration process. Simple split samples were also used at the beginning of neural computations [Jang, 1996], but rapidly authors found that a third data set called “test” was necessary to ensure the robustness of the model (see for instance Heuvelmans et al. [2006], Kurtulus and Razack [2007, 2010], and Kurtulus and Flipo [2012] for applications in hydrology/hydrogeology). Considering the complexity of hydrological problems and the equifinality issue, a test data set is thus included in the fitting process of the hydrological DPBM to ensure that the model does not contain long-term deviation.

[9] It is still discussed whether or not the calibration process should be manual, fully automated or hybrid. The main argument for a fully automated calibration relies on the observation that the main error source in modeling comes from the modeler’s perception and subjectivity [Boesten, 2000; Heuvelmans et al., 2006]. Some authors explicitly introduced the modeler’s point of view in the process using expert knowledge as an extra constraint during calibration [Boyle et al., 2000; Hundedcha and

Bárdossy, 2004; Shrestha and Rode, 2008]. The main drawbacks of all these methods are the following: none of them deals with a complete DPBM of the hydrosystem, they are time consuming [Zhang *et al.*, 2009], and finally it is not proven that the full automatization significantly improves the calibration process, even for only one part of the hydrosystem. Moreover, for hydrosystem modeling, the number of potential objective functions (either the type of criteria or the spatial distribution) is high, and overall optimization algorithms may get stuck into a local minimum [Carrera *et al.*, 2005]. These two points lead to the conclusion that a fully automatized method for hydrosystem DPBM is not yet pragmatically achievable without further theoretical and computer program developments. But as held by Poeter and Hill [1997] and stated Carrera *et al.* [2005, p. 218] “the time is ripe for standard use of inverse modeling in groundwater studies aimed at aquifer characterization and management.” It hence seems to be relevant for hydrosystem model fitting to manually drive automated calibration sequences for the groundwater part [Mazi *et al.*, 2004; Rozos *et al.*, 2004].

[10] In the current paper, the aim is to understand the Beauce hydrosystem functioning. For this a hybrid fitting method has been developed that couples a trial and error method based on expert knowledge with an automated inversion technique for the aquifer subsystem.

1.3. Review of Inverse Methods in Hydrogeology

[11] As stated by Pasquier and Marcotte [2006], the need to better understand complex hydrogeological systems requires the use of numerical tools capable of simulating groundwater migration in heterogeneous media. Numerical models require aquifer hydraulic properties and also boundary and initial conditions over the whole aquifer domain. Since parameter measurements are scarce and often unreliable [Carrera *et al.*, 2005; de Marsily *et al.*, 1999], the reconstruction of a hydraulic conductivity field, which numerically reproduces the observed heads, is usually difficult [de Marsily *et al.*, 1999]. This reconstruction is commonly based on inverse modeling. Poeter and Hill [1997] emphasize the importance of the automatization of the inverse problem solving, as well as Carrera *et al.* [2005, p. 220] who state “that routine application of inverse modeling is the future. The sooner it starts, the better prepared will hydrologists be to face the challenges of the soon-to-come future.”

[12] During the last 40 years, many approaches have been developed to identify the hydrodynamical properties of aquifer subsystems [Carrera *et al.*, 2005; Cooley, 1985; de Marsily *et al.*, 1999; Hefez *et al.*, 1975; Hoeksema and Kitanidis, 1985; Hendricks Franssen *et al.*, 2009; McLaughlin and Townley, 1996; Yeh, 1986]. Table 1 summarizes 55 publications dedicated to the application of inverse methods in hydrogeology. It focuses on the target fields—transmissivity (T) and/or storage coefficient (S)—the required data to run the method and the type of case study: real or hypothetical. Roughly, the methods can be subdivided into three types. The most widespread type (40 publications) uses at some point a global optimization with a simple or a combination of criteria as an objective function. The second type (7 publications) focuses on local optimization. The last type (8 publications) consists in a soft computing global optimization, which barely handles the quantification of uncertainties [Kurtulus and Flipo, 2012].

[13] Among all the reviewed methods involving complex mathematical notions, it is difficult to determine which ones perform “best,” especially that published inter-comparisons are rare and lead to the same conclusion that none of them significantly outperforms the other ones [Hendricks Franssen *et al.*, 2009; Zimmerman *et al.*, 1998]. In their review on inverse methods Carrera *et al.* [2005, p. 212] confirm this conclusion: “all the methods discussed previously [...] are identical from the estimation viewpoint”. Most of the methods referenced in Table 1 are based on the minimization of a global objective function, using linear or non linear optimization algorithms, either sequential or Monte Carlo based. The usage of sophisticated methods such as the Pilot Points, the Maximum Likelihood, or the ATM does not prevent the nonuniqueness issue when applied to real case studies. Even recent developments using soft computing have not overcome this issue. Without obvious proofs that one method outperforms the other ones, the pragmatical choice of the inverse method is mainly driven by the fact that the method was already tested for real case study of large spatial extend. Among the reviewed papers in Table 1, only 9% are dedicated to a spatial area larger than 1000 km². This leads to the rejection of most of these methods.

[14] Contrary to most of the inverse methods, the inversion by Successive Flux Estimation (see SFE in Table 1), derived from the Comparison Model Method (CMM, Ponzi and Lozej [1982]), performs a local minimization. This is in agreement with the philosophy of trial and error manual calibration. It also has the advantage of being efficient [Pasquier and Marcotte, 2006], having a relatively low computational cost, and having been validated for a real 2500 km²-aquifer unit [Vassena *et al.*, 2008], which is the same order of magnitude as the Beauce aquifer system. Thus the SFE method was coupled with manual calibration to perform the calibration of the Beauce hydrosystem model. The emphasis of this paper is on developing a practical approach to DPBM parameterization with a reasonable computational cost, and therefore the hybrid methodology presented here is not compared to more complex, computationally expensive optimization schemes.

2. Experimental Site and Data

2.1. Hydrological Description of the Beauce Aquifer

[15] This study focuses on the Beauce aquifer unit located in the center of France. This unit is part of a complex aquifer system, which is drained by two surface basins: the Seine basin for the northeastern part and the Loire basin for the southwestern part (Figure 1). The Beauce aquifer is mainly composed of limestone from the Oligocene. The aquifer is mostly unconfined, except for the southern part that is excluded from this model [Monteil *et al.*, 2010]. Its thickness varies from 10 m to 200 m. The Beauce aquifer covers an area of 8000 km². The topography ranges from 70 m up to 190 m. The land use consists of agriculture (74%), forest (18%), urban areas (7%) and free water bodies (1%). The stream network is heterogeneous with only a few rivers in the central part of the Beauce area (Figure 1), suggesting that most of the runoff is infiltrating toward the aquifer unit, whereas a denser river network develops over the remainder of the domain.

Table 1. Inversion Techniques in Hydrogeology^a

Method	Geo	ML	Target	Temporal Framework	Data	Case Study	Reference
Adjoint			T,S	trans	punctual HH	485 km ²	<i>Vemuri and Karplus</i> [1969]
M			T	stea	HH map	10 km ²	<i>Emsellem and de Marsily</i> [1971]
M			T	stea	HH map	hypo	<i>Yeh and Tauxe</i> [1971]
LA			T	stea	HH map, T at boundaries	hypo	<i>Frind and Pinder</i> [1973]
M			T	trans	HH map, S	hypo	<i>Sagar et al.</i> [1975]
M			T,S	stea, trans	punctual HH	210 km ²	<i>Nutbrown</i> [1975]
M			T	trans	punctual HH, S	hypo	<i>Distefano and Rath</i> [1975]
M			T,S	trans	punctual HH	800 km ²	<i>Navarro</i> [1977]
PPM	×		T	stea	punctual HH and T	310 km ²	<i>de Marsily</i> [1978]
ML + M	×	×	T	stea	HH map	hypo	<i>Neuman and Yakowitz</i> [1979]
ML + M		×	T	stea	HH map	400 km ²	<i>Neuman et al.</i> [1980]
LCM	×	×	T	none	punctual HH and T	hypo	<i>Kitanidis and Vomvoris</i> [1983]
M	×		T	stea	HH map	hypo	<i>Yeh and Yoon</i> [1981] and <i>Sadeghipour and Yeh</i> [1984]
LSM	×	×	T	none	HH map and punctual T	hypo	<i>Dagan</i> [1985]
M			T	trans	HH time series	hypo	<i>Sun and Yeh</i> [1985]
ML + M		×	T	stea, trans	punctual HH and T	100 km ²	<i>Carrera and Neuman</i> [1986]
M			K	stea	punctual HH and T	200,000 km ²	<i>Cooley et al.</i> [1986]
Simplex			T	stea	punctual HH and T	16 km ²	<i>Woodbury and Smith</i> [1987]
LSM	×	×	T	none	punctual HH and T	real	<i>Rubin and Dagan</i> [1987]
Adjoint	×		T	trans	HH time series, punctual K	hypo	<i>Sun and Yeh</i> [1992]
Geostat	×		T	stea	punctual HH and T	hypo	<i>Ahmed and de Marsily</i> [1993]
PPM	×		T	stea	HH map, punctual T	720 km ²	<i>RamaRao et al.</i> [1995], <i>LaVenue et al.</i> [1995], <i>Cooley and Hill</i> [2000], <i>RamaRao et al.</i> [2000]
SSC	×		T	stea	HH map, punctual T	hypo	<i>Gomez-Hernandez et al.</i> [1997], <i>Capilla et al.</i> [1997]
Geostat	×		T	stea	HH map, punctual T	4 km ²	<i>Roth et al.</i> [1998]
SSC	×		T	stea, trans	pumping test, punctual pressure	hypo	<i>Wen et al.</i> [1999, 2002]
Geostat	×		T	stea, trans	punctual T, pumping test	100 m ²	<i>Meier et al.</i> [2001]
PPM	×		T	stea	HH map, punctual T	6 km ²	<i>Doherty</i> [2003]
Geostat	×		T	stea	HH map, punctual K	hypo	<i>Hernandez et al.</i> [2003]
Adjoint			T	stea, trans	HH map, pumping test	hypo	<i>Medina and Carrera</i> [2003]
PPM	×	×	T	trans	punctual HH, pumping test	hypo	<i>Alcolea et al.</i> [2006]
PPM	×		T	stea	HH map	160 km ²	<i>Renard and Jeannée</i> [2008]
Adjoint			T,S	trans	HH map	hypo	<i>Liu et al.</i> [2009]
AMT			T,S	trans	HH time series	4400 km ²	<i>Majdalani and Ackerer</i> [2011]
AMT			T,S	trans	HH time series	6.25 ha	<i>Ackerer and Delay</i> [2010]
CMM			T	stea	HH map	hypo	<i>Ponzini and Lozej</i> [1982]
DSM			T	stea	2 HH map, 1 T value	hypo	<i>Giudici et al.</i> [1995], <i>Gonzalez et al.</i> [1997], <i>Giudici et al.</i> [1998], <i>Giudici and Vassena</i> [2006]
SFE			T,S	stea, trans	HH map	hypo	<i>Pasquier and Marcotte</i> [2006]
CMM			T	stea	HH map	2500 km ²	<i>Vassena et al.</i> [2008]
GA			K	none	HH map, punctual K	hypo	<i>Heidari and Ranjithan</i> [1998]
SC			T	none	TDS	19,000 km ²	<i>Mukhopadhyay</i> [1999]
SC			T	none	HH map or punctual HH	hypo	<i>Garcia and Shigidib</i> [2006]
SC	×		T	none	punctual T	3850 km ²	<i>Kholghi and Hosseini</i> [2006]
SC			T	none	pumping test	hypo	<i>Lin and Chen</i> [2006] and <i>Samani et al.</i> [2007]
GA			T	none	HH map	hypo	<i>Ayvaz et al.</i> [2007]
SC			T,S	trans	punctual HH	hypo	<i>Karahan and Ayvaz</i> [2008]

^aMethod names: M, Minimization; LA, Linear Algebra; ML, Maximum Likelihood; LCM, Linearized Cokriging Method; LSA, Least Square Approach; LSM, Linearized Semi analytical Method; Geostat, Geostatistics; PPM, Pilot Point Method; SSC, Sequential Self Calibration; CMM, Comparison Model Method; SFE, Successive Flux Estimation; DSM, Differential System Method; AMT, Adaptative Multiscale Triangulation; SC, Soft Computing; GA, Genetic Algorithm. Geo, Method using geostatistics. ML, Method using Maximum likelihood. Target: T, Transmissivity; K, Hydraulic conductivity; S, Storage coefficient. Temporal Framework: stea, steady state; trans, transient state. Data: HH, Hydraulic Head; TDS, Total Dissolved Solids Content. Case study: hypo, hypothetical case study; “punctual” refers to point measurement, and “map” to a spatial distribution.

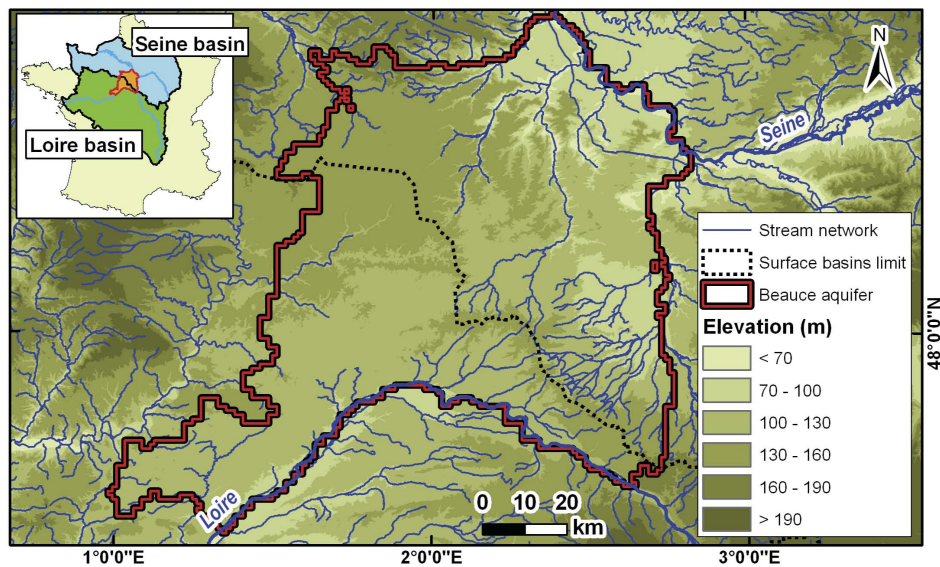


Figure 1. Studied domain: Beauce aquifer is located on two surface basins (Loire basin and Seine basin) on a rather flat area with few streams.

[16] Météo France provides a database that indicates daily precipitation and potential evapotranspiration on a $8 \text{ km} \times 8 \text{ km}$ grid starting from 1950 [Quintana-Seguí *et al.*, 2008]. The mean annual precipitation over the period 1998 to 2008 ranges from 620 to 790 mm yr^{-1} (Figure 2).

2.2. Data Characterizing the Functioning of the Hydrosystem

[17] The HYDRO database (see www.hydro.eaufrance.fr) gathers discharges at 142 gauging stations draining more than 250 km^2 of the Loire basin ($120,000 \text{ km}^2$)

between 1970 and 2009. 82 of them are located out of the zone of aquifer influence and 5 gauging stations are on the Beauce aquifer. Discharges are recorded at a daily time step. Due to technical issues time series are sometimes discontinuous.

[18] The ADES database (see www.ades.eaufrance.fr) provides piezometric head variations at 78 piezometers located on the Beauce aquifer between 1970 and 2009. The time lag of the measurements varies from daily to monthly. In addition, snapshot campaigns have been conducted aiming at mapping piezometric head distribution for the

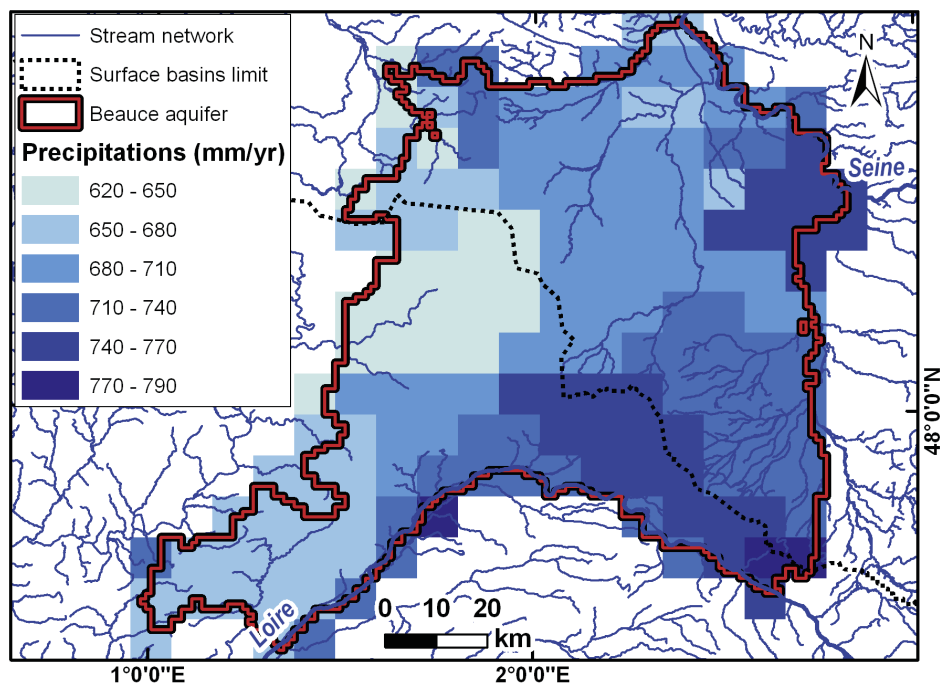


Figure 2. Mean annual precipitation over the years 1998 to 2008 (SAFRAN database, Météo France).

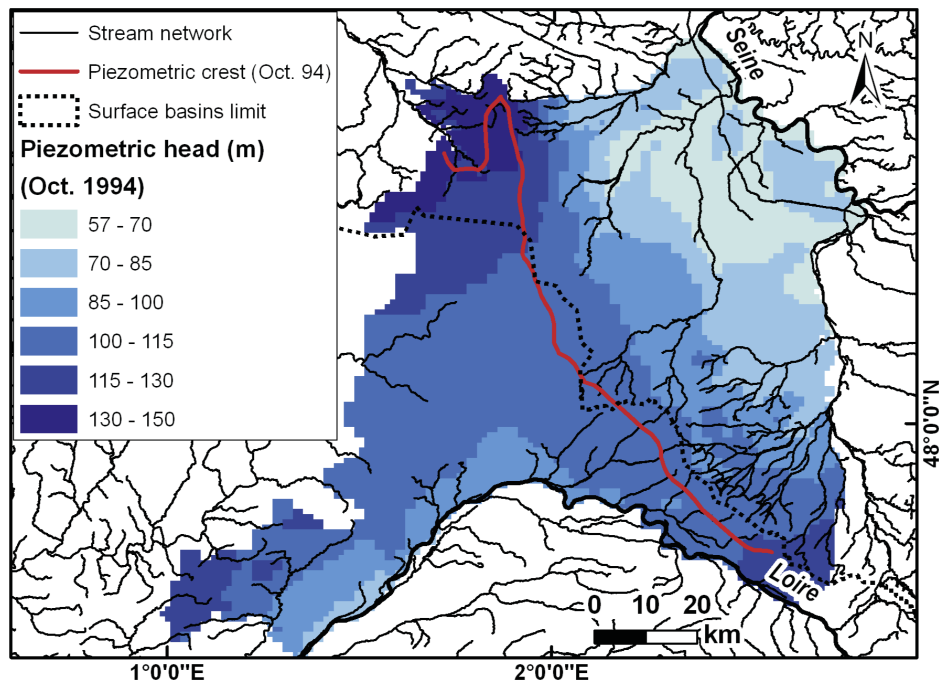


Figure 3. Reference piezometric map: low-water conditions, October 1994 [Maget, 1995].

low-water regime of October 1994 (Figure 3, Maget [1995]), and for the high-water regime of March 2002 [Verley *et al.*, 2003]. The piezometric crest between the hydrogeological basins of the Loire and the Seine differs from the surface basin limit. The location of this crest evolves between high-water and low-water regimes during the year.

[19] Since 1998, measurements of water withdrawals provide the volume of water pumped away from the aquifer unit

for irrigation, drinking water supply and industrial needs. These measurements are provided with two values per year: the annual volumes and the volumes withdrawn between April and October. For agricultural withdrawals, the coordinates of each pumping well are given. The amount of water pumped for drinking water supply and industrial needs are attributed to the centroid of the administrative district of the withdrawal (mean area of 14 km², Figure 4).

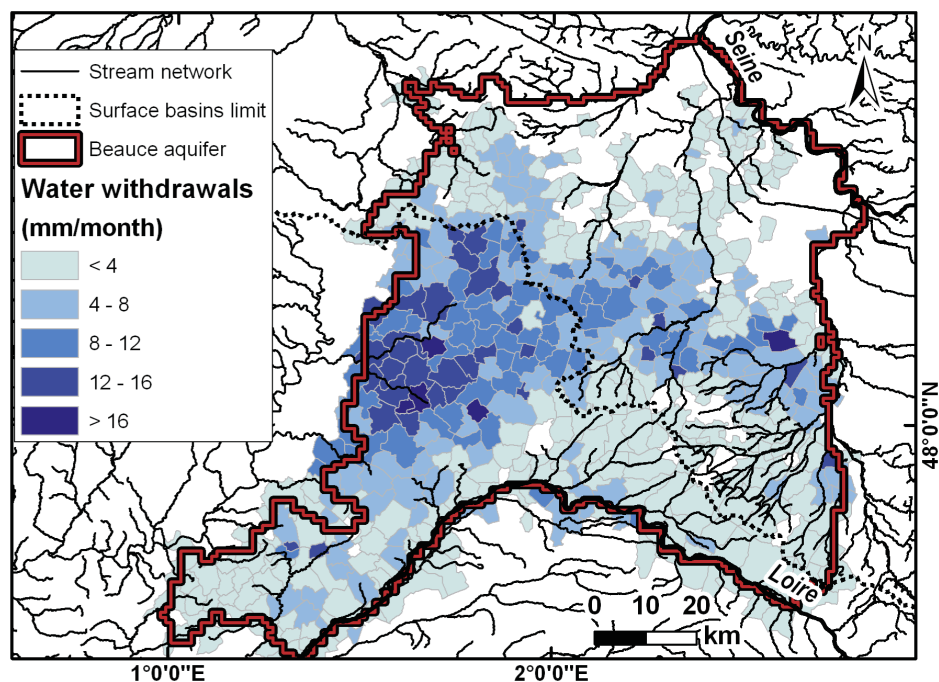


Figure 4. Water withdrawals distribution by administrative districts between April and October 2003.

3. Hydrosystem Modeling

[20] The hydrosystem is conceptually divided into three main compartments: surface, unsaturated zone and saturated zone. Five processes are associated with these compartments: surface water mass balance, watershed runoff, river discharge, infiltration through the unsaturated zone and ground-water flow.

3.1. Eau-Dyssée Principles

[21] The Beauce hydrosystem is modeled using the Eau-Dyssée platform, which couples specialized models to assess water resources in a basin. The water cycle is simulated with five modules (Figure 5): surface water mass balance, surface water routing, water routing in the river network, flow through the unsaturated zone, and ground-water dynamics [Saleh et al., 2011].

[22] The surface water mass balance is computed on units (called production functions) that are derived from the intersection of the land use units (i.e., urban areas, arable lands, ...) and geological units (i.e., limestones, cristalline rocks, ...). The surface water mass balance module computes the water mass balance by splitting precipitation into real evapotranspiration, surface runoff, infiltration, and soil storage, using a seven-parameter conceptual model [Deschesnes et al., 1985] (see parameters CRT, DCRT, FN, IMAX, CI, RMAX, CR, Figure 5). The surface runoff partitioned by the module is routed to the river network using isochronal zones. Isochronal

zones introduce a delay between the runoff generation and the time it reaches the river network. The in-stream water routing module, RAPID [David et al., 2011], is based on the Muskingum routing scheme:

$$V(t) = k [\alpha Q_{in}(t) + (1 - \alpha) Q_{out}(t)], \quad (1)$$

where $V(t)$ [m^3] is the water volume contained in a river cell at a given time step t , $Q_{in}(t)$ and $Q_{out}(t)$ [$\text{m}^3 \text{s}^{-1}$] the input and output discharges of the river cell, k [s] the transfer time between two adjacent cells and α [-] a weighting parameter ranging between 0 and 1.

[23] The amount of water available for infiltration is transferred vertically to the groundwater model by an unsaturated-zone component, which consists of a succession of reservoirs [Ledoux, 1980]. Each reservoir discharges into the next one depending on a constant drainage coefficient that simulates an exponential drainage throughout time (Figure 5). The groundwater model SAM, based on Ledoux et al. [1984, 1989], is a regional spatially distributed model, which computes flows and hydraulic heads in the saturated zone. It solves the diffusivity equation on a multilayered aquifer system using finite differences [de Marsily, 1986]:

$$\text{div}(\vec{T} \text{grad} h) = S \frac{\partial h}{\partial t} + Q, \quad (2)$$

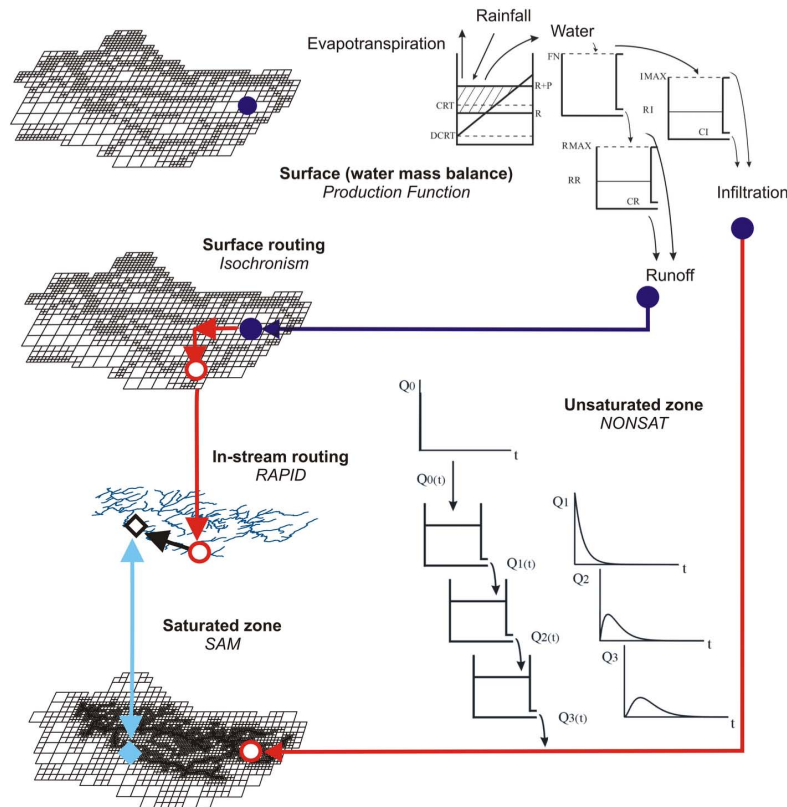


Figure 5. Eau-Dyssée platform. R , $R + P$, RR and RI are dynamical variables calculated at each computational time step. Color Arrows display the successive steps of computation during one time step. Modified symbols from the start to the end of an arrow displays the fact that the input is modified by the simulated process.

where h is the piezometric head [m], $\bar{T}$ the transmissivity tensor [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$], S the storage coefficient [-] and Q the source term [$\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$].

[24] The model structure is built according to the geometry of the main aquifer units. For each aquifer unit, the flow is 2-D, whereas it is vertically 1-D in the aquitard between two horizontal layers. The piezometric head is dynamically coupled to the stream network via river cells. It allows for calculating an exchanged water flux between the two components [Saleh *et al.*, 2011]. The former version of this model has successfully simulated surface and groundwater flow in many basins of varying scales and hydrogeological settings: the Haute-Lys and Caramy basins [Ledoux, 1980], the HAPEX-MOBILHY study [Boukema, 1987], the Rhône basin [Habets *et al.*, 1999], the Seine basin [Gomez *et al.*, 2003], and the Somme basin [Korkmaz *et al.*, 2009]. It is currently being implemented on the French alluvial part of the Rhine river [Thierion *et al.*, 2010].

3.2. Implementation of the Hydrosystem Model

[25] Eau-Dyssée has been implemented at a daily time step on the Loire basin over two periods of 10 years for calibration (August 1998 to July 2008) and validation (August 1974 to July 1984). It has also been implemented over 35 years for the test period (August 1974 to July 2009).

[26] The drainage pattern has been obtained from a 1 km-DEM (Digital Elevation Model) using the HydroDem software [Leblois, 2008], which divides the domain into a grid containing 63,234 squared cells of 1 to 16 km^2 . Among those, 16,141 river cells are used for the river routing model.

[27] The units, where the hydrological mass balance is computed, so called production functions, are determined by the intersection of the land use (Corine Land Cover, CLC) and the geology (INRA Soil database) using ArcGIS 9.3 software. Data extracted from CLC include 5 types of land use (see section 2.1). Data from INRA Soil database

define 9 types of geological structures. After intersecting these two types of data, 21 production functions are defined for the Loire basin. As mentioned in section 2.1, the Beauce aquifer is characterized by a high infiltration rate. To account for this property, an index characterizing the capacity of the soil to infiltrate water has been used. This index, called the index of persistence and development of network (IDPR, Mardhel *et al.* [2006]), is based on the comparison of the density between the actual hydrographic network and the one computed from a DEM. By construction, IDPR ranges between 1 and 2000 for very high infiltration rate and runoff only, respectively. Areas where the IDPR value is less than 100 have been defined as high infiltration areas with a specific set of parameters for the associated Eau-Dyssée production function. This increases the number of production functions to 22 on the Loire basin surface. Only 12 of them are used for the surface covering the Beauce aquifer (Figure 6).

[28] River routing is calibrated using a relative transfer time index $I_{tr}(i)$ from one river cell i to the downstream cell i_{ds} , which is derived from the DEM slopes [Golaz-Cavazzi, 1999]:

$$I_{tr}(i) = \frac{dl}{\sqrt{\frac{|z(i) - z(i_{ds})|}{dl}} \cdot S_{DA}(i)^\beta}, \quad (3)$$

where dl [km] is the distance between the center of the two cells, $z(i)$ [km] the elevation of the cell i , S_{DA} [km^2] the accumulating upstream drainage area, and β [-] a calibration parameter (here $\beta = 0.25$, Korkmaz [2007]). Then a relative transfer time index to the outlet, $I_{tr \rightarrow \text{outlet}}$, is calculated for each cell:

$$I_{tr \rightarrow \text{outlet}} = \sum_{k=i}^{\text{outlet}} I_{tr}(k), \quad (4)$$

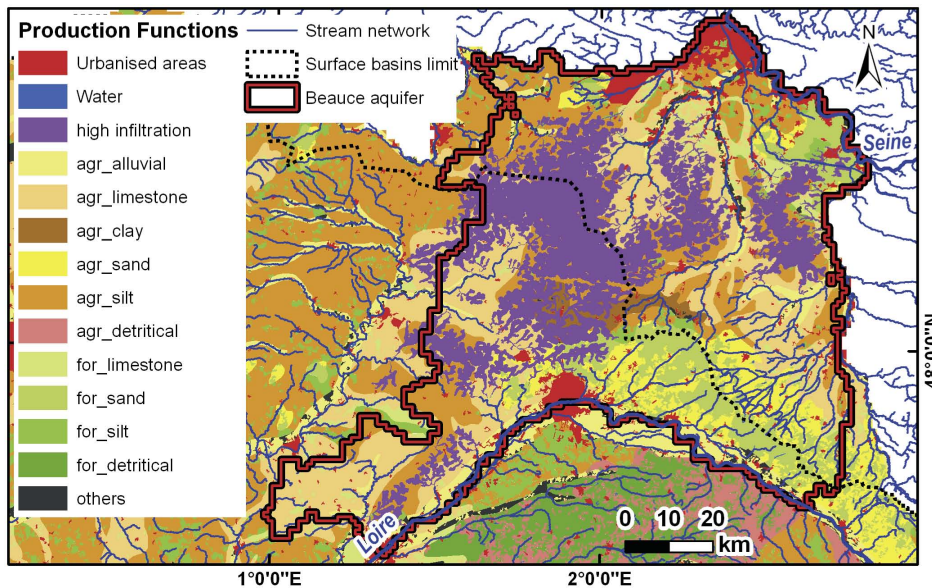


Figure 6. Production function distribution: “agr_”: agricultural areas; “for_”: forest and seminatural areas; “high infiltration”: IDPR < 100.

$I_{tr_{i \rightarrow outlet}}$ is used to distribute the value of the coefficient k of The Muskingum equation (equation (1)):

$$k(i) = \frac{I_{tr_{i \rightarrow outlet}} - I_{tr_{ds \rightarrow outlet}}}{I_{tr_{max}}} T_C, \quad (5)$$

where $I_{tr_{max}}$ is the maximum relative time index to the outlet, and T_C [s] the global concentration time of the basin.

[29] The unsaturated zone model is built as a cascade of 5 m-thick reservoirs. The thickness is determined as the difference between the topographic level and the piezometric head distribution that characterizes the aquifer high-water level [Korkmaz *et al.*, 2009].

[30] The first estimate of the hydrodynamic parameters is obtained from a study whose purpose was to design a management model of the Beauce aquifer [Bonnet *et al.*, 2004]. The initial state for the groundwater model is obtained from the piezometric map of October 1994 (Figure 3), followed by a simulated warming-up period of 4 years from August 1994 to August 1998. The water content in the unsaturated zone is initialized spinning up three times the warming-up period.

[31] Water withdrawals for drinking water supply, irrigation, and industrial needs are taken into account in the groundwater model.

4. Hybrid Fitting Methodology

[32] As stated by *de Marsily* [1994, p. 220], the parameterization of a DPBM “is created by the data set” itself. In the case of the Loire basin, the overall length of the piezometric data set is 39 year (from 1970 to 2009). An enhancement of the two steps calibration/validation process was introduced by artificial intelligence methods, which consider that three subsets are needed to ensure the consistency of the model. The two first subsets, called calibration and validation, are jointly used in a first fitting step to avoid the

over-fitting of the model [Kurtulus and Flipo, 2012], whereas a third subset substitutes the historical validation subset to ensure that the model performs fairly well on an independent data set.

[33] Considering the time needed for a full model run under transient conditions, the model is calibrated over 10 year (1998–2008) and validated over another 10 year period (1974–1984) under different forcing conditions. Finally the model is run over 39 year (4 year of warming-up and 35 year of simulation) for the test scenario, which enables checking that no bias is induced by a long-term simulation, especially for the overlapping calibration period (10 year).

4.1. Calibration

[34] The calibration methodology (Figure 7) consists of two main steps: the surface water component calibration and the groundwater component calibration, the latter being looped inside the former one. First the global water mass balance, the concentration time of the basin (T_C), and the parameter k of the Muskingum model (Figure 5, step 1), are precalibrated over the 10 year calibration period [Monteil *et al.*, 2010]. To obtain this, gauging stations located outside the aquifer area have been used.

[35] The calibration of the global water mass balance consists in manually fitting the CRT and DCRT parameters of the 22 production functions (Figure 5). The objective function is the comparison of the 10 year average discharge at each gauging station outside the aquifer system. For this step, the assumption that the effective rainfall (See the variable “water” in Figure 5) is instantaneously transferred to the river network is made. Afterward, the overall concentration time of the basin and the parameter k of the Muskingum model have been calibrated at the same stations, ensuring that the simulated and observed flood peaks are synchronized. Once fitted, these parameters remain constant for the remainder of the fitting process.

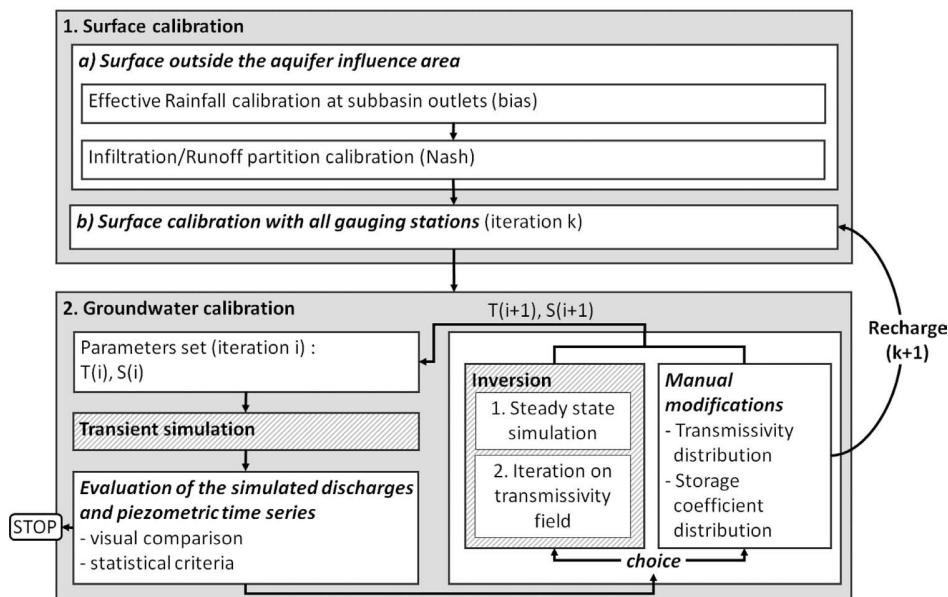


Figure 7. Hybrid calibration methodology. Dashed boxes show the automated steps.

[36] The fitting of the surface and groundwater components are then looped together. The loop on the surface component is denoted by k (Figure 7, loop k), and the loop on the groundwater component is denoted by i (Figure 7, loop i), the latter being looped inside the former. A new iteration k of the surface component is started when the groundwater component is stuck around a local minimum (the choice to start a new iteration k completely relies on the modeler's knowledge). The splitting of the effective rainfall into runoff and infiltration (parameter FN, Figure 5), the fitting of the drainage coefficients of both runoff and infiltration reservoirs of the production functions (parameters IMAX, CI, RMAX and CR, Figure 5), and the transfer through the unsaturated zone are calibrated first. The recharge calculated at the iteration k of the surface component fitting becomes then a boundary condition for the fitting of the groundwater model. Thus, the groundwater flow calibration is conducted iteratively (Figure 7, loop i) inside the iterative fitting of the surface component (Figure 7, loop k). For each iteration i , a transient simulation is run over the calibration period. Statistical criteria and visual comparisons of time series are used to assess the quality of the simulation. Two approaches are combined to calibrate the hydrodynamic parameters. The first one consists in manually changing the parameters' values, whereas the second one is based on an inversion method using SFE [Pasquier and Marcotte, 2006]. The choice of the method is based on the modeler's knowledge. The two methods are described in sections 4.1.1 and 4.1.2. After modifying the hydrodynamic parameters, another iteration is run until the model user is satisfied with the result. This stops the overall fitting process.

[37] Performances of the transient simulation (Figure 7, loop i) are evaluated using statistical criteria computed at each gauging station for the discharge and at each piezometer for the hydraulic head. The criteria used to assess the quality of the simulated discharges are the relative bias, the Nash-Sutcliffe efficiencies [Nash and Sutcliffe, 1970], and the correlation coefficients computed on daily values. Nash-Sutcliffe efficiencies have also been computed on log-transformed values of discharges to increase the weight of the low-flow period in the objective function. Criteria computed at piezometers are the absolute bias, the root-mean-square errors (RMSE) and the correlation coefficients on weekly values [Flipo et al., 2005; Saleh et al., 2011]. Bias and RMSE are calculated at each piezometer and also with all the piezometric head time series merged together. Due to its mathematical nonadditivity, the correlation coefficient is calculated only at each piezometer. To obtain an overview of the simulation quality, the number of piezometers where the correlation coefficient is higher than 0.9 are counted ($N_{\rho>0.9}$). Another criteria is $N_{\sigma[0.8;1.2]}$, which is the number of stations where the ratio of the standard deviation of the simulated time series by the standard deviation of the observed ones ranges between 0.8 and 1.2. It gives an assessment on how well the model reproduces the variability of the observed piezometric heads.

[38] The purpose of the calibration is to improve these criteria and also the visual comparison between observations and simulated time series. As it is usually the case for this kind of complex study, the pragmatic methodology does not ensure to find the absolute optimum, but aims at getting close to it.

4.1.1. Manual Calibration

[39] The principle of manual calibration is to tune the transmissivity or the storage coefficient distribution based on hydrogeologist expert knowledge that takes into account the aquifer functioning at a regional scale using the reference piezometric map (Figure 3). Statistical criteria and visual comparison of time series are also used to quickly identify where parameters need to be tuned. For instance, bias and RMSE indicate where the transmissivity (T) should be modified. The ratio between observed and simulated standard deviation at a piezometer is used as an indicator to identify where the storage coefficient (S) needs to be modified locally.

4.1.2. Inversion of Low-Flow Piezometric Head Distribution

[40] The inversion by SFE is used to automatically calibrate the transmissivity field. This method, similar to the one used by Ponzini and Lozej [1982], compares reference and simulated piezometric head gradient distributions to locally modify transmissivity without the usage of a nonlinear optimization technique. Vassena et al. [2008] show that this method is easy to use and convenient for a relatively large aquifer unit (Table 1). SFE couples an iterative algorithm of inversion with a finite element model that solves the diffusivity equation. For the purpose of this study the same iterative algorithm has been coupled with a finite volume version of the SAM model (see section 3.1), which solves the system of equations under steady state conditions.

[41] The iterative inversion algorithm consists of two main steps. First an initial transmissivity field (seed field) is needed to initialize the inversion process. The reference hydraulic head gradient distribution is calculated with the reference piezometric map. At iteration $i + 1$, a steady state solution of the diffusivity equation is calculated using the transmissivity field of iteration i . If the resulting head distribution matches the reference one, the inversion stops. Otherwise, the transmissivity field is modified according to the ratio of the simulated gradient by the reference one weighted with an additive coefficient w to avoid numerical divergences. Then the next iteration starts and so on until every piezometric head calculated at the center of each cell equals $h^{Ref} \pm \epsilon$, ϵ being the stopping criteria [m].

[42] This algorithm has been implemented on a $1 \text{ km} \times 1 \text{ km}$ squared-cell mesh (8578 cells) where intercells transmissivities are computed. Data and parameters needed to run the inversion process are the reference piezometric map, the seed transmissivity field, and the recharge distribution. For the inversion, the boundary conditions have been defined as no flux at the border of the domain and imposed hydraulic heads at each river cell.

[43] The reference piezometric map is defined by the projection of the low-water piezometric map from October 1994 on the inversion mesh (Figure 3).

4.1.3. Analysis of the Calibration Process

[44] The hybrid fitting of the hydrosystem model involves 122 transient-condition simulations (Figure 8). Nine simulations have been selected to illustrate three aspects of the model sensitivity:

[45] 1. The sensitivity to the storage coefficient (simulations α , Table 2). Usually the inverse problem is solved

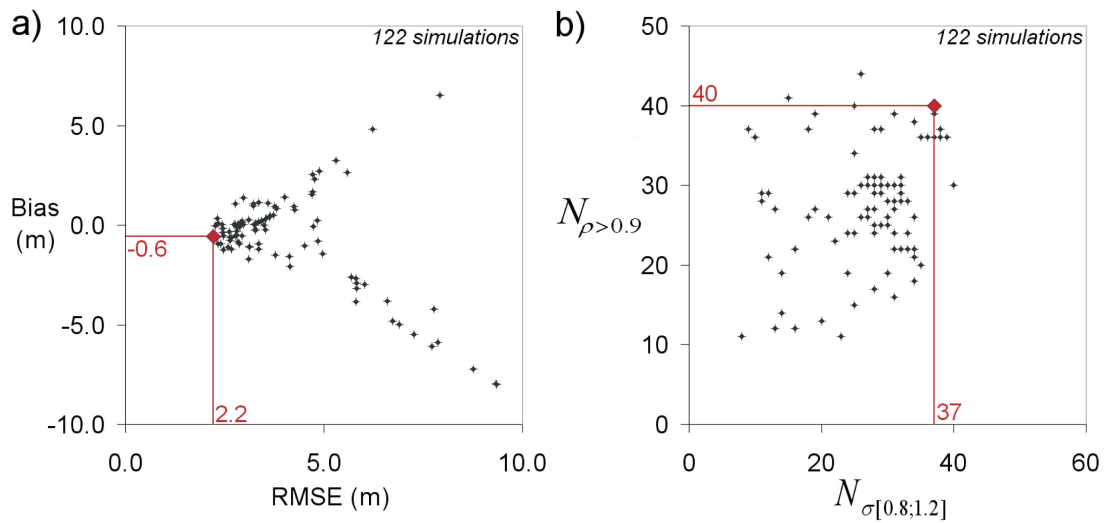


Figure 8. Multicriteria analysis of the calibration process, red diamond represents the Pareto optimum (*Sim.04*): (a) Bias versus RMSE, (b) Number of piezometers where correlation coefficient between observations and simulations is higher than 0.9 versus number of piezometers where the ratio between standard deviation of the observations over the one of the simulation results is between 0.8 and 1.2.

under steady state conditions only (around 75% of the papers referenced in Table 1), which does not allow for fitting the storage coefficient. The effect of the storage coefficient on calibration is thus quite unclear;

[46] 2. The sensitivity to the transmissivity field (simulations β , Table 2). This analysis is motivated by the fact that the solution of the inverse problem using SFE with no a priori transmissivity data for each flow tube is not unique [Marcotte and Pasquier, 2007; Pasquier and Marcotte, 2006; Ponzini et al., 2007];

[47] 3. The sensitivity to the recharge estimate used for the inversion process (simulations γ , Table 2). The inversion is based on an approximated recharge estimate, which is usually not distributed. Assessing the distribution of the recharge significantly improves the performance of the inversion method [Zimmerman et al., 1998].

[48] The simulation *Sim.00* corresponds to the simulation initialized with parameters derived from the study by Bonnet et al. [2004] (denoted by T_0 , Table 2). *Sim.04* is the

simulation displaying the best performances (RMSE, bias, $N_{\rho>0.9}$, $N_{\sigma[0.8;1.2]}$). This simulation uses a manually calibrated storage coefficient field and a transmissivity field derived from the combination of steady state inversion and manual calibration.

[49] Sensitivity to the storage coefficient is illustrated with simulations *Sim.00*, *Sim.01*, *Sim.04* and *Sim.05* (simulations α , Table 2). *Sim.00* and *Sim.01* are run with the same transmissivity field (initial field T_0 , Table 2) and different storage coefficient distributions (initial field, S_0 , for the first one, and the one derived from manual calibration, S_f , for the second one). In the same way, *Sim.04* and *Sim.05* are run with the calibrated transmissivity field (T_f) and the calibrated or the initial storage coefficient distribution (S_f or S_0 , Table 2). The purpose is to illustrate the effect of the storage coefficient calibration for two transmissivity fields.

[50] The transmissivity calibration combines manual calibration and inversion process. The sensitivity to transmissivity

Table 2. Model Parameters and Statistical Criteria of Simulations Illustrating the Calibration Process^a

	T	S	Seed T	Recharge	α	β	γ	Bias	RMSE	$N_{\rho>0.9}$	$N_{\sigma[0.8;1.2]}$
<i>Sim.00</i>	T_0	S_0	—	—	×			−4.8 m	6.7 m	22	16
<i>Sim.01</i>	T_0	S_f	—	—	×	×		−5.0 m	6.9 m	19	30
<i>Sim.02</i>	inversed	S_f	$10^{-2} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	May–Sept.		×		3.2 m	5.3 m	25	29
<i>Sim.03</i>	inversed	S_f	T_0	May–Sept.		×		2.7 m	5.8 m	28	30
<i>Sim.04</i>	T_f	S_f	—	—	×			−0.6 m	2.2 m	40	37
<i>Sim.05</i>	T_f	S_0	—	—	×			−0.6 m	2.5 m	37	9
<i>Sim.06</i>	inversed	S_f	T_f	May–Sept.		×	×	0.0 m	3.2 m	36	37
<i>Sim.07</i>	inversed	S_f	T_f	Year*			×	−0.2 m	3.3 m	36	37
<i>Sim.08</i>	inversed	S_f	T_f	Year			×	−0.3 m	3.3 m	36	37
<i>Sim.09</i>	inversed	S_f	T_f	May–Sept.*			×	0.8 m	3.8 m	38	37

^aT, transmissivity field; S, the storage coefficient; Seed T, seed field for inversion; Recharge, the period for which the mean recharge has been computed, either infiltration to the saturated component or infiltration to the top of the unsaturated component (with *). α , simulations illustrating the sensitivity to storage coefficient manual calibration; β , simulations illustrating the sensitivity to transmissivity hybrid calibration; γ , simulations illustrating the effect of recharge estimate on inversion.

fields is illustrated by the simulations β in Table 2: *Sim.01* uses the initial one (T_0), whereas *Sim.04* uses the calibrated one (T_f). These two simulations illustrate the improvement achieved through transmissivity calibration. The sensitivity of the inversion process to the seed transmissivity field is investigated under transient conditions corresponding to three simulations: *Sim.02*, *Sim.03* and *Sim.06*. Three kinds of seed transmissivity fields have been used: uniform value (*Sim.02*), initial transmissivity field (T_0 , *Sim.03*), and reference transmissivity field (T_f , *Sim.06*).

[51] Simulations γ show certain aspects of the sensitivity to the recharge estimate. The recharge distribution is defined in order to correspond to a steady state that represents low-water conditions. In order to assess the sensitivity to the recharge estimate, four cases of inversion have been tested with the same seed transmissivity field and different recharge estimates. Simulations *Sim.07* and *Sim.09* consider the infiltration from the surface module to the top of the unsaturated zone, whereas simulations *Sim.06* and *Sim.08* take into account the delay induced by the transfer through the unsaturated zone and consider the flux from the unsaturated zone toward the top of the aquifer unit. These fluxes have been averaged over 10 years (1998–2008) considering two periods: either the whole year, or the 5 months (May–September) before the time when the reference piezometric map was initially sampled (17 October to 4 November 1994). The purpose of this sensitivity analysis is to assess the impact on the recharge estimate of, first, the delay induced by the unsaturated module, and, second, the effect of time averaging.

4.2. Validation and Test of the Calibrated Model

[52] The calibrated model is used over a 10 year period (August 1974 to July 1984) to validate the parameter distribution. The initial state of the simulation is obtained after a 4 year warming-up period (August 1970 to July 1974). The piezometric head distribution of August 1970 has been set equal to the one of August 2004. Indeed, the piezometric heads of August 2004 are very close to those of August 1970 because the aquifer unit follows a decreasing trend, which starts from approximately the same level in both cases.

[53] Between 1975 and 1998, only the total amount of annual water withdrawn for irrigation is known over the Beauce area without any information on the spatial distribution. To obtain a spatial distribution for these years, the distribution has been set equal to the one of 1998. Furthermore at each water withdrawal location, the amount of pumped water has been set equal to the one of 1998, weighted by the ratio of the total water withdrawal of the current year divided by the total water withdrawal of 1998. The amount of pumped water for water supply and industrial needs are taken equal to the one of 1998. These withdrawal estimates might introduce uncertainties in the simulation results because the location of the pumping wells is supposed to be unchanged, and also because the withdrawn volume is approximated. To assess the influence of the water withdrawn estimates on the simulation results, two simulations are run: one taking into account the estimated water withdrawals, and the other one not.

[54] Data time series are available over a 39 year period (1970–2009). To benefit from the length of this data set, a

test simulation of 35 year (August 1974 to July 2009) has been run to ensure that the model has no long-term divergence. The methodology is the same as for the validation, with the initial state computed on a 4 year warming-up period (August 1970 to July 1974). The validation and test simulations are compared to observed piezometric time series: 53 between 1974 and 1984 (validation) and 78 between 1974 and 2009 (test).

5. Hydrosystem Model Performances

5.1. Short Overview of the Surface Model Performances

[55] As stated in section 4.1, the global water mass balance, the concentration time of the basin (T_C), and the parameter k of the Muskingum model, are precalibrated over the 10 year calibration period (For more detail on this part of the work, see *Monteil et al.* [2010]). Only a brief summary is given in this section). 83 gauging stations located outside the aquifer area have been used (Figure 9). The assumption that the effective rainfall is instantaneously transferred to the river network is made.

[56] T_C has been calibrated to 7 days [*David et al.*, 2011]. Values of the Muskingum coefficient k range between 500 and 2000 s, equivalent to velocity ranging from 0.5 to 2 m s⁻¹ for the 1 km × 1 km grid [*Monteil et al.*, 2010]. Figure 9 displays the absolute discharge bias distribution at gauging stations out of the aquifer system. Most of the bias (69 among 83) are between -2 and +2 m³ s⁻¹, which indicates that the model correctly simulates the global in-stream amount of water. Most of the stations exhibiting an absolute bias between 2 and 9 m³ s⁻¹ are located on the Vienne river, where many hydraulic works, and especially small reservoirs, are not taken into account in the model. The gauging station located on the Loire river upstream of the aquifer system has a bias of 10.6 m³ s⁻¹, which corresponds to 3.6% of the main discharge. Finally, the absolute discharge bias at the outlet of the basin is 24.1 m³ s⁻¹, which corresponds to 2.5% of the average discharge. We assume that part of the bias is due to water storage in the aquifer system, which increases the transfer time of infiltrated water.

5.2. Groundwater Model Calibration Results

[57] The groundwater model calibration process leads to transmissivity and storage coefficient distributions (Figure 10) that better represent the piezometric head variations than the initial ones derived from *Bonnet et al.* [2004] (Table 2). The parameter distributions are partly refined by the use of the automated inversion method, but the final parameter sets are obtained with a final trial and error process (see *Sim.04*, Table 2). Thus the automated inversion method by SFE is not robust enough to determine the ‘best’ transmissivity field. This issue will be discussed in section 5.3. The calibrated model is referred to as *Sim.04* in the remainder of the paper (Tables 2 and 3). Over 50% of the piezometer time series have a correlation coefficient above 0.9 and 83% above 0.7. For *Sim.04*, the global piezometric head RMSE is 2.2 m (Table 2). The bias distribution at piezometer locations was significantly improved by the calibration process (Figure 11a and 11b). Indeed for the initial parameter distributions, the total bias and RMSE are -4.8 m

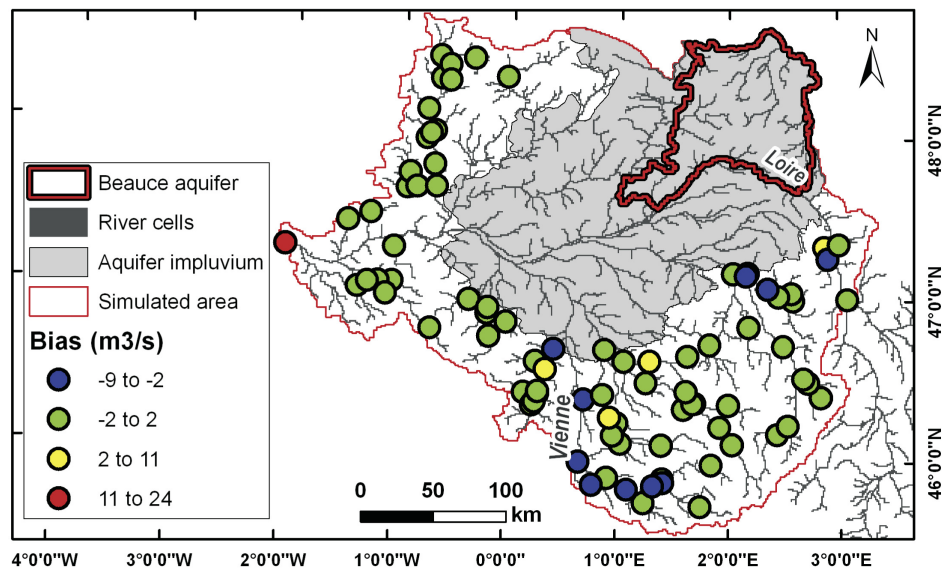


Figure 9. Distribution of the absolute discharge bias at gauging stations out of the aquifer system. Results of the surface component precalibration.

and 6.8 m, respectively, whereas they reach -0.6 m for the bias and 2.2 m for the RMSE after calibration. The main improvements are located in the center of the modeled area, which corresponds to the moving piezometric crest between the northeastern and the southwestern part of the aquifer (Figures 11a and 11b). Finally 41% of the piezometer time series have an RMSE below 1 m and 78% below 2 m. The global piezometric head RMSE is plotted at a weekly time step for the simulations *Sim.00* and *Sim.04* (Figure 12). The global RMSE increases continuously over the calibration period for *Sim.00* (from 5.2 to 7.8 m, Figure 12). It remains stable around 2.2 m for the calibrated model (*Sim.04*, Figure 12). This clearly displays the stability of the fitted model. These results are satisfactory considering

that piezometric heads are computed on 1 to 16 km² cells whereas the observed time series are local measurements.

5.3. Analysis of the Groundwater Model Calibration Process

[58] Sensitivity results are presented in Table 2. As an example, Figure 13a displays the evolution of the piezometric head at one piezometer throughout the overall calibration process. Figure 13a also illustrates the sensitivity of the piezometric head to different parameter distributions. Criteria obtained from the 122 simulations are displayed in Figure 8, which exhibits the criteria clouds, as well as the associated Pareto fronts. *Sim.04* is located in the optimum of the Pareto front (Figure 8a) and achieves satisfactory

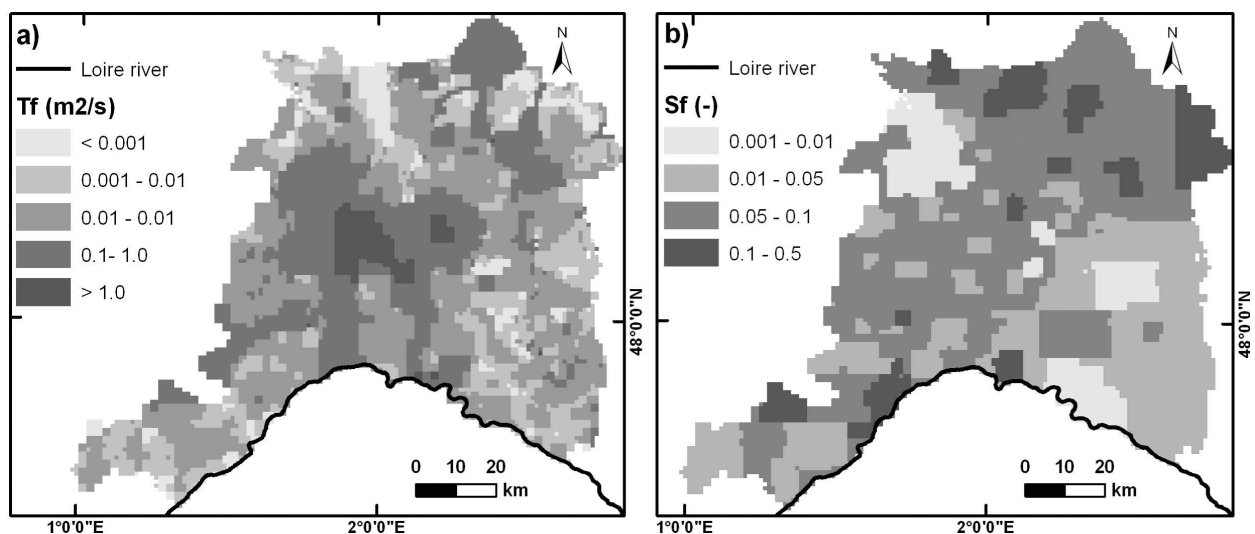


Figure 10. Calibrated parameter distributions (*Sim.04*): (a) Transmissivity field, (b) Storage coefficient field.

Table 3. Statistical Criteria for Reference Simulation Validation and Test^a

	Pumping	Bias	RMSE	$N_{\rho>0.9}$	$N_{\sigma[0.8;1.2]}$	N_{tot}
<i>Sim.04</i>	measured	−0.6 m	2.2 m	40	37	78
Validation	estimated	−1.5 m	2.8 m	12	35	53
Test	no	0.5 m	2.5 m	22	9	78
	estimated ^b	−0.7 m	2.6 m	25	40	78

^aThe reference simulation is *Sim.04*. The validation is 1974–1984. The test is 1974–2009. $N_{\rho>0.9}$, number of piezometers where the correlation coefficient is higher than 0.9; $N_{\sigma[0.8;1.2]}$, number of stations where the ratio of SD of the simulated time series over SD of the observed ones ranges between 0.8 and 1.2; N_{tot} , number of piezometric times series.

^bThe water withdrawals for the test simulation are estimated for the period 1974–1997 and measured for 1998–2009.

performances with the criteria linked to variance analysis ($N_{\rho>0.9}$ and $N_{\sigma[0.8;1.2]}$, Figure 8b).

5.3.1. Sensitivity to Storage Coefficient

[59] The manual calibration of the storage coefficient field significantly improves the dynamics of the simulated time series (Figure 13a). Indeed the simulated spatiotemporal

shape of the piezometric head distribution better matches the one of the observations for *Sim.01* than for *Sim.00*. This is the case in terms of both the global trend and the annual variations of the piezometric heads. Even if, globally the bias and the RMSE are not improved by the storage coefficient distribution, it significantly improves the quality of the overall dynamics of the system, because $N_{\sigma[0.8;1.2]}$ increases from 16 to 30 between the two simulations (see α , Table 2). For each piezometer the base level of piezometric head is controlled by the transmissivity field, which locally modifies the piezometric gradients. Thus the storage coefficient does not affect the global bias significantly (see simulations α in Table 2).

[60] Simulations *Sim.06* and *Sim.04* use the calibrated transmissivity field with different storage coefficient distributions. As stated previously, the storage coefficient distribution has little influence on the criteria. The global bias remains constant around −0.6 m for both simulations. The global RMSE equals 2.5 m and 2.2 m. The impact on standard deviation is more visible with $N_{\sigma[0.8;1.2]}$, which increases from 9 to 37 between the two simulations. Finally, the combination of the transmissivity field and the storage

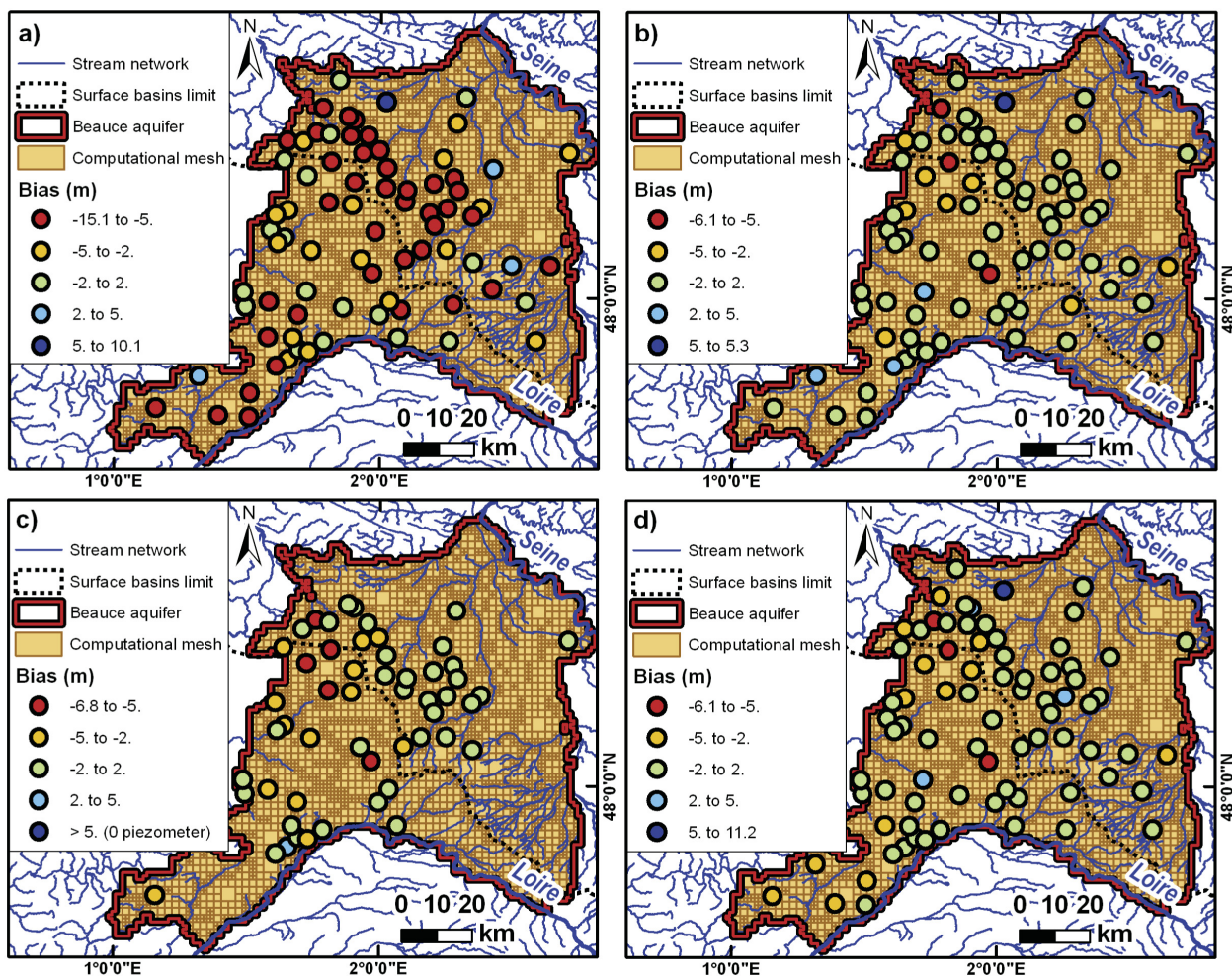


Figure 11. Bias distribution of hydraulic head at piezometer locations for: (a) Initial bias distribution (*Sim.00*), (b) reference simulation (*Sim.04*), (c) Validation 1974–1984 with estimated pumping, (d) Test 1974–2009 with estimated pumping.

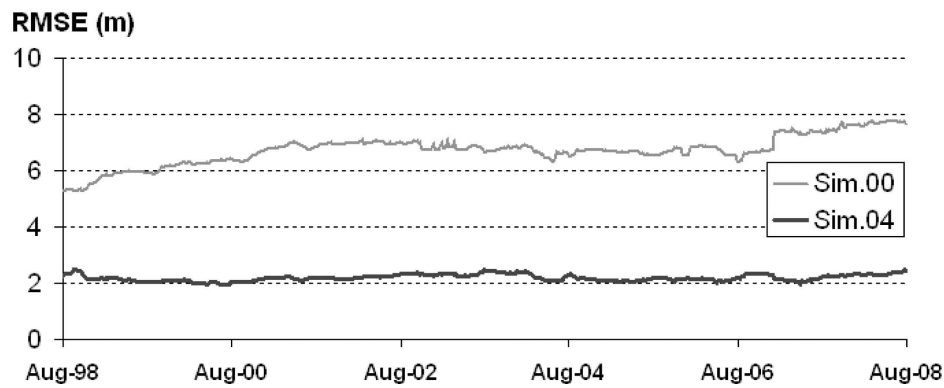


Figure 12. Global piezometric head RMSE ($N = 74$) over the calibration period (weekly time step).

coefficient leads to satisfactory statistical criteria (see *Sim.04* in Table 2).

5.3.2. Sensitivity to Transmissivity

[61] Figure 13a and Table 2 indicate that the inversion by successive flux estimation (SFE) is very sensitive to the initial seed transmissivity field. The comparison between *Sim.01* and *Sim.04* shows the effect of the transmissivity field calibration on global statistical criteria (see β , Table 2): the bias decreases from -4.8 m to -0.6 m, and the RMSE from 6.7 m to 2.2 m. As stated previously, the four criteria have been significantly improved due to the fact that the

transmissivity field plays a major role in fitting the local average level of the piezometric head (Figure 13a). The comparison of all simulations (*Sim.00* to *Sim.04*) also shows that the transmissivity field has a more important impact on global criteria than the storage coefficient (Table 2). The transmissivity field permits to fit the low frequency signal for long-term filtering of the recharge signal, whereas the storage coefficient filters the signal with a higher frequency.

[62] Once the model has been fit, three simulations (*Sim.02*, *Sim.03* and *Sim.06* in Table 2) are run to better understand the impact of the seed transmissivity field on

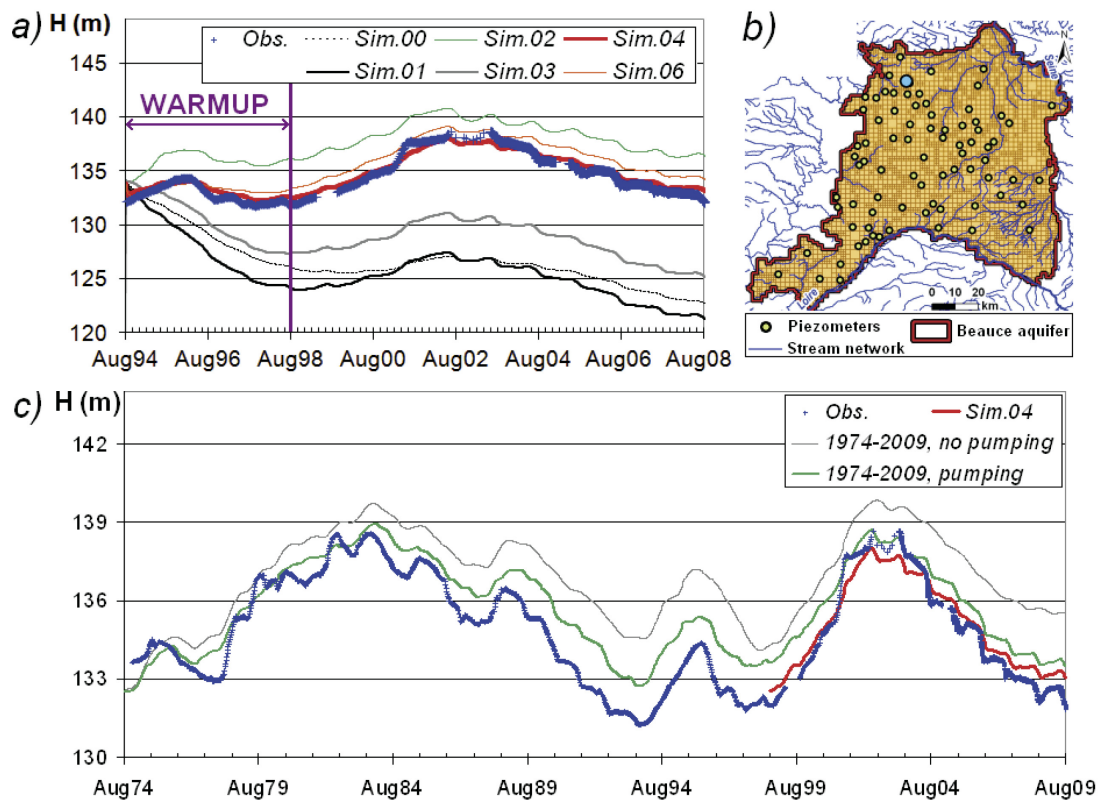


Figure 13. Observed and simulated time series at piezometer 02565X0019: (a) Warmup and calibration (1998–2008), (b) Piezometer location on the Beauce aquifer, (c) Test simulations (1974 to 2009) and simulation *Sim.04* starting from 1998.

the inversion results. A simulation using an inversion with a realistic transmissivity value as a seed field (*Sim.02*) leads to a better RMSE than a simulation using inversion from the initial seed transmissivity field from *Bonnet et al.* [2004] (*Sim.03*), although $N_{\rho>0.9}$ increases with the use of a distributed seed field. The best results of the automated inversion are obtained with the final transmissivity field (T_f) as a seed field (*Sim.06*). From a pragmatical perspective, these results confirm the nonuniqueness of the inverted transmissivity field obtained with the SFE method [Giudici and Vassena, 2008; Marcotte and Pasquier, 2007; Ponzini et al., 2007; Vassena et al., 2008].

5.3.3. Sensitivity to Recharge Estimate

[63] The final transmissivity field is not derived from an automated inverse calibration, but from a hybrid one. This is partly due to the difficulty of estimating an appropriate distributed recharge field corresponding to the approximated low-water level of October 1994, which was used as a reference map. Simulations γ (Table 2) show that the misestimate of the recharge distribution leads to a higher global RMSE (ranging between 3.2 and 3.8 m). $N_{\rho>0.9}$ also decreases for all scenarios of recharge estimates.

[64] When mean annual infiltration is considered, the model provides very similar results, whether the recharge is defined at the top or at the bottom of the unsaturated component (bias of -0.2 m for *Sim.07* and -0.3 m for *Sim.08*, Table 2). The results are improved when considering a recharge coming from the unsaturated model for a shorter period of time (May–September). Indeed, the bias is negative for *Sim.08* (-0.3 m), which suggests that the transmissivity field tends to let the water flow, because the recharge is overestimated when considering the annual average. The bias is slightly positive for *Sim.06* (0.02 m), which means that the recharge definition for low-water conditions has been improved. Not taking into account the unsaturated zone (*Sim.09*) induces a recharge underestimation that leads to poor results (RMSE of 3.8 m, bias of 0.8 m) because the model overestimates time transfer, so that it tends to keep the water in the aquifer by underestimating transmissivity.

[65] Hence, the difficulty of assessing the distributed recharge for the inversion process turns out to be one of the major arguments for the usage of a coupled approach (manual and automated) for hydrosystem model fitting. Even if the problem can be solved theoretically, this is not achievable when dealing with a real case study, because the recharge distribution, which is a boundary condition, contains uncertainties that are difficult to quantify. The problem of hydrosystem fitting turns then to be at the first order a measurement problem and only at the second order a computational issue, which involves the choice of a pertinent methodology.

5.4. Validation and Test Results

[66] The validation criteria are close to those of the calibration (Table 3): bias of -1.5 m instead of -0.6 m, and RMSE of 2.8 m instead of 2.2 m. The bias distribution (Figure 11c) is also very close to the one of the calibration period (Figure 11b). Slight discrepancies between the two simulations are located around the piezometric crest the between Seine and the Loire basins, which corresponds to

the area where uncertainties about the boundary conditions of each hydrosystem are the highest. Another source of uncertainty might also be due to withdrawal overestimations or/and mislocations.

[67] Criteria for the test period (35 year) are similar to those of the calibration period, and slightly better than the validation ones (bias of -0.7 m and RMSE of 2.6 m). It seems that there is no long-term divergence in the model. Indeed, Figure 13c shows that the test simulation taking into account water withdrawals is close to the calibration simulation for the last 10 years of the test simulation. The long-term hydraulic head trends are also well simulated by the fitted model. The bias distribution of the test simulation is also close to the calibration and validation distributions (Figures 11b, 11c, and 11d). The trends of the aquifer fluctuations are well reproduced with periods of aquifer recharge and drainage (Figure 13c). The bias distribution is also close to the distribution resulting from the calibration and is rather uniformly distributed over 78 piezometers (Figure 11d).

[68] Accounting for water withdrawals in the simulation (Table 3) decreases the test performances in terms of bias (-0.7 m instead of 0.5 m without pumping) and RMSE (2.6 m instead of 2.5 m), but improves the number of well correlated time series ($N_{\rho>0.9}$ equals 25 instead of 22), as well as their local variability ($N_{\sigma[0.8;1.2]}$ raising from 9 to 40). For the simulated piezometric head time series (Figure 13c), accounting for water withdrawals in the simulation reduces the piezometric head of 1.2 m in average, and up to 2 m in the worst cases (see for instance the period of August 1993, Figure 13c). This comparison indicates there was already an intensive anthropogenic use of water resources during the 1970s and 1980s.

6. Aquifer Mass Balance

[69] Figure 14 displays the mean piezometric head simulated over 35 year (Figure 14a) and the associated standard deviation (Figure 14b). These two maps are very similar to those established for the calibration period. The aquifer is drained in the North by the Seine river and in the South by the Loire river. Higher standard deviations are simulated in the southeastern part of the aquifer. As expected, the piezometric heads are higher than those of the piezometric map of October 1994 (Figure 3), which corresponds to low-water conditions.

[70] An application of the fitted model is to calculate the evolution of the water mass balances over the whole Beauce hydrosystem for the 35 year at a yearly time step (Figure 15). Over the years 1974 to 2009, mean precipitation reaches 696 mm yr^{-1} of which 77% evaporates. The remainder is partitioned between runoff (4%, 28 mm yr^{-1}) and infiltration toward the saturated zone (19%, 132 mm yr^{-1}). The outflow coming from the saturated zone toward the surface water due to springs and wetlands is 107 mm yr^{-1} . Aquifer water withdrawals are 22 mm yr^{-1} (3% of the rainfall), which corresponds to 17% of the infiltration flux. Finally, the volume of water stored in the aquifer increases by 4 mm yr^{-1} which represents only 1% of the total amount of rainfall over this period, or 3% of the infiltration (Figure 15).

[71] Figure 15 indicates that the different components of the water mass balance fluctuate around these mean values. The question then remains to understand whether or not

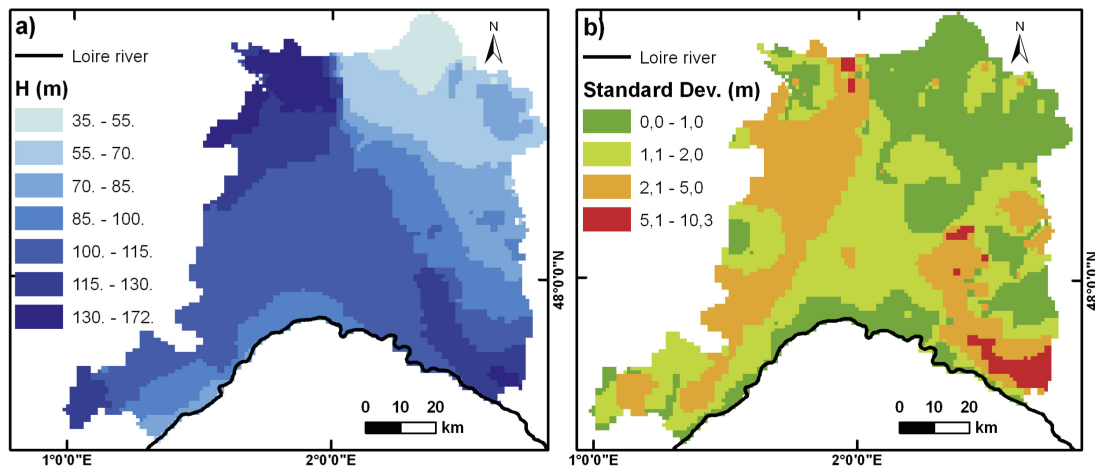


Figure 14. Results of test simulation: (a) Temporal mean piezometric head distribution (1974–2009), (b) Associated standard deviation distribution.

there is a trend toward water resources decrease due to climate change or anthropogenic overexploitation. To analyze the temporal variability of the water cycle more precisely, a linear model of coregionalization [de Fouquet *et al.*, 2007, 2011; Polus *et al.*, 2011] is fitted for the effective rainfall, the infiltration and the variation of storage (Figure 16) using three components: a nugget effect, a linear component and a periodic component. The maximum time lag is 20 year for analyzing the 35 year of the simulation.

[72] First there is no linear component resulting from the fitting, which means that the water cycle components are stationary (the mean value is defined for the 35 year period of time). The total sills for effective rainfall, aquifer recharge and stock variation are 9239, 5023, and 3106 (mm yr^{-1})², respectively (corresponding to 96, 71 and 56 mm yr^{-1}). Then, it appears that most of the variance of each water cycle component is modeled by a nugget effect: 67% for the effective rainfall, 59% for the recharge and 65% for the storage variation. The remainder of each variance is

explained by a periodic component, which has a 17.2 yr period. The amplitudes of the periodic component are 48, 39 and 28 mm yr^{-1} , respectively. This periodic component may be correlated to long-term climate variation, but it has to be confirmed on longer time series (35 year are not sufficient to bring to light a 17.2 year period of time). It also appears that the statistical components of each water cycle component are positively correlated, the correlation coefficient being systematically above 0.87.

[73] Table 4 summarizes the statistical analysis of the three water cycle components of interest. Due to the stationarity of the linear model of coregionalization, it can be stated that the hydrosystem model simulates a long-term slight increase of water resources (mean storage variations of 4 mm yr^{-1}). Water mass balance is very sensitive to the time period over which it is calculated. In our case study, the standard deviation of the storage variation (56 mm yr^{-1} , Table 4) is 1 order of magnitude higher than the average value (4 mm yr^{-1} , Table 4). It means that depending on the

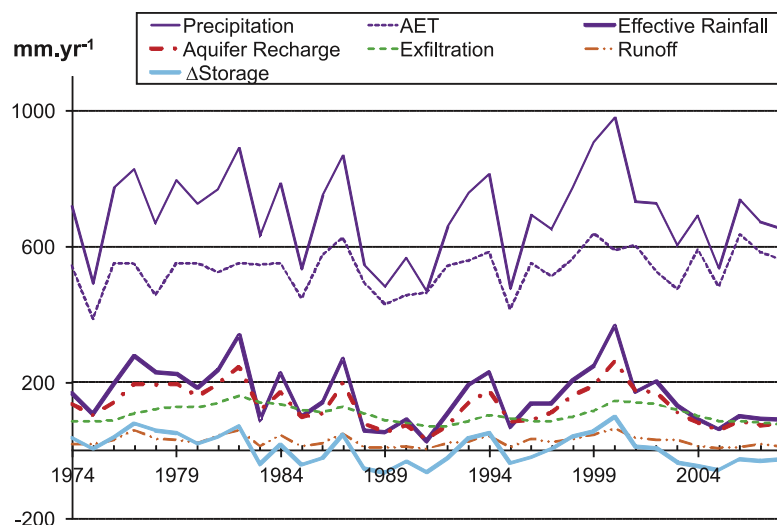


Figure 15. Beauce aquifer annual water balance. AET: Actual Evapotranspiration, Δ storage: water storage variation.

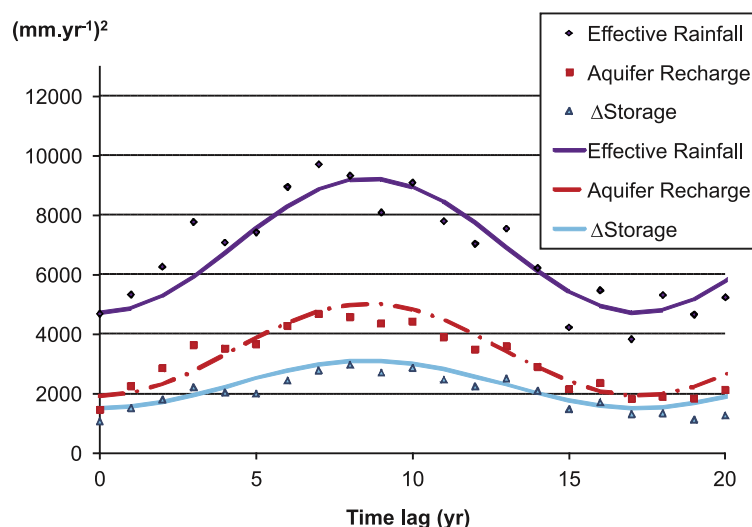


Figure 16. Experimental (points) and adjusted (lines) variograms on the mean annual effective rainfall, aquifer recharge and aquifer water storage variation.

time lag taken to calculate the water mass balance, the storage variation can be either positive or negative. Assuming that the hydrosystem model calculates an accurate storage variation (the internal model errors potentially being greater than the slight storage variation of 4 mm yr^{-1}), there is no obvious trend of water resource decrease over the 35 year period of time, neither due to climate nor to human activities.

7. Conclusion

[74] The case study presented here demonstrates that a hybrid fitting method is a useful approach for parameterizing a comprehensive model to represent the complexity in real hydrosystems. In this study, a state-of-the-art hybrid fitting methodology for a hydrosystem containing a mono layer aquifer system was developed for the Beauce area (8000 km^2). The methodology also integrates recent developments in soft computing by means of a third data set for ensuring a proper fitting of the model. Moreover the method fully takes advantage of all available data (piezometric time series, low-water regime piezometric maps, discharge hydrographs).

[75] Using an automated inversion method significantly improves the time spent to calibrate the model. The usage of a transient inversion technique is not justified for real case hydrosystem modeling, because the transmissivity

field has a more important impact on global criteria than the storage coefficient (Table 3). This is due to the fact that the transmissivity field permits to fit the low-frequency signal for long-term filtering of the recharge signal, whereas the storage coefficient filters the signal with a higher frequency. For long-term insight into aquifer system functioning, the priority is thus to first fit the transmissivity field. For the problem of model fitting it is of primary importance to accurately assess the boundary conditions and especially the distributed aquifer recharge.

[76] Finally, the fitted hydrosystem model simulates a mean global water storage increase of 4 mm yr^{-1} over the period 1974–2009. Assuming that the internal model errors are negligible, it means that there is no trend of water resources decrease leading to scarcity over the 35 year period, neither due to climate nor to human activities.

[77] **Acknowledgments.** This work is a contribution to a collaborative research project between EDF Research and Development, BRGM (French Institute for Geology and Mineral Resources), Loire-Bretagne Water Authority, DREAL Loire-Bretagne, Météo-France and Geosciences Department of MINES ParisTech, aiming at assessing the aquifer system contribution to the in-stream low-flow discharge distribution in the Loire Basin. These institutions are kindly thanked for having provided abundant information and data about the Loire basin. We would like to thank Nicolas Desassis for the adjustment of the linear model of coregionalization and Angela Armakola for revising the English version of the paper. We also would like to thank the two anonymous reviewers for their very detailed and useful comments.

Table 4. Statistical Analysis of Water Cycle Components Over 35 Years^a

	Mean Value	Global SD ^b	Nugget Effect SD	Periodic SD
Effective rainfall	162	96	83	48
Aquifer Recharge	132	71	59	39
Δ Storage	4	56	48	28

^aMean values and Standard deviations are in mm yr^{-1} .

^bWarning: Standard deviations are non additive, only the variance is.

References

- Abbott, M., J. Bathurst, J. Cunge, P. O'Connell, and J. Rasmussen (1986a), An introduction to the European Hydrological System. 1. History and philosophy of a physically based distributed modelling system, *J. Hydrol.*, **87**, 45–59.
- Abbott, M., J. Bathurst, J. Cunge, P. O'Connell, and J. Rasmussen (1986b), An introduction to the European Hydrological system. 2. Structure of a physically based distributed modelling system, *J. Hydrol.*, **87**, 61–77.
- Ackerer, P., and F. Delay (2010), Inversion of a set of well-test interferences in a fractured limestone aquifer by using an automatic downscaling parameterization technique, *J. Hydrol.*, **389**, 42–56.

- Ahmed, S., and G. de Marsily (1993), Cokriged estimation of aquifer transmissivity as an indirect solution of the inverse problem: A practical approach, *Water Resour. Res.*, 29(2), 521–530, doi:10.1029/92WR00226.
- Alcolea, A., J. Carrera, and A. Medina (2006), Pilot points method incorporating prior information for solving the groundwater flow inverse problem, *Adv. Water Resour.*, 29(11), 1678–1689.
- Anderton, S., J. Latron, and F. Gallart (2002a), Sensitivity analysis and multi-response, multi-criteria evaluation of a physically based distributed model, *Hydrol. Processes*, 16, 333–353.
- Anderton, S., J. Latron, S. White, P. Llorens, F. Gallart, C. Salvany, and P. O'Connell (2002b), Internal evaluation of a physically based distributed model using data from a Mediterranean mountain catchment, *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 6(1), 67–83.
- Ayvaz, M. T., H. Karahan, and M. M. Aral (2007), Aquifer parameter and zone structure estimation using kernel-based fuzzy c-means clustering and genetic algorithm, *J. Hydrol.*, 343, 240–253.
- Beven, K. (1989), Changing ideas in hydrology. The case of physically-based model, *J. Hydrol.*, 105, 157–172.
- Beven, K. (2006), On undermining science?, *Hydrol. Processes*, 20, 3141–3146.
- Boesten, J. (2000), Modeller subjectivity in estimating pesticide parameters for leaching models using the same laboratory data set, *Agric. Water Manage.*, 44(1–3), 389–409.
- Bonnet, M., S. Floriat, and L. Demongodin (2004), Reprise du modèle de gestion de la nappe de Beauce. Phase I—Calage en régime permanent et transitoire, *Tech. Rep. RPP04M026b*, 169 pp., Agence de l'Eau Loire Bretagne, Orléans, France.
- Boukerna, B. (1987), Modélisation des écoulements superficiels et souterrains dans le sud-ouest de la France: Approche du bilan hydrique, PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Paris.
- Boyle, D., Gupta, and S. H. V. Sorooshian (2000), Toward improved calibration of hydrologic models: Combining the strengths of manual and automatic methods, *Water Resour. Res.*, 36(12), 3663–3674.
- Capilla, J., J. Gomez-Hernandez, and A. Sahuquillo (1997), Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data 2. Demonstration on a synthetic aquifer, *J. Hydrol.*, 203, 175–188.
- Carrera, J., and S. Neuman (1986), Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: 3. Application to synthetic and field data, *Water Resour. Res.*, 22(2), 228–242.
- Carrera, J., A. Alcolea, A. Medina, J. Hidalgo, and L. J. Slooten (2005), Inverse problem in hydrogeology, *Hydrogeol. J.*, 13, 206–222.
- Cooley, R. (1985), A comparison of several methods of solving nonlinear regression groundwater flow problems, *Water Resour. Res.*, 21(10), 1525–1538.
- Cooley, R. L., and M. Hill (2000), Comment on RamaRao et al. [1995] and LaVenue et al. [1995], *Water Resour. Res.*, 36(9), 2795–2797, doi:10.1029/2000WR900174.
- Cooley, R., L. Konikow, and R. Naff (1986), Nonlinear-regression groundwater flow modeling of a deep regional aquifer system, *Water Resour. Res.*, 22(13), 1759–1778.
- Dagan, G. (1985), Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities: The inverse problem, *Water Resour. Res.*, 21(1), 65–72.
- David, C. H., F. Habets, D. R. Maidment, and Z.-L. Yang (2011), RAPID applied to the SIM-France model, *Hydrol. Processes*, 25(22), 3412–3425, doi:10.1002/hyp.8070.
- de Fouquet, C., D. Gallois, and G. Perron (2007), Geostatistical characterization of the nitrogen dioxide concentration in an urban area. Part I: spatial variability and cartography of the annual concentration, *Atmos. Environ.*, 41(32), 6701–6714.
- de Fouquet, C., L. Malherbe, and A. Ung (2011), Geostatistical analysis of the temporal variability of ozone concentrations. comparison between CHIMERE model and surface observations, *Atmos. Environ.*, 45(20), 3434–3446.
- Delfs, J., C. Park, and O. Kolditz (2009), A sensitivity analysis of hortonian flow, *Adv. Water Resour.*, 32(9), 1386–1395, doi:10.1016/j.advwatres.2009.06.005.
- de Marsily, G. (1978), De l'identification des systèmes hydrogéologiques, PhD thesis, Univ. Pierre et Marie Curie—Paris VI, Paris.
- de Marsily, G. (1986), *Quantitative Hydrogeology—Groundwater Hydrology for Engineers*, Academic, San Diego, Calif.
- de Marsily, G. (1994), Quelques réflexions sur l'utilisation des modèles en hydrologie, *Rev. Sci. l'Eau*, 7, 219–234.
- de Marsily, G. (2008), Eau, changements climatiques, alimentation et évolution démographique, *J. Water Sci.*, 21(2), 111–128.
- de Marsily, G., E. Ledoux, A. Levassor, D. Poitral, and A. Salem (1978), Modelling of large multilayered aquifer systems: Theory and applications, *J. Hydrol.*, 36, 1–34.
- de Marsily, G., J.-P. Delhomme, F. Delay, and A. Buoro (1999), Regards sur 40 ans de problèmes inverses en hydrogéologie, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 329, 73–87.
- Deschesnes, J., J.-P. Villeneuve, E. Ledoux, and G. Girard (1985), Modeling the Hydrologic Cycle: The MC Model. Part I—Principles and description, *Nord. Hydrol.*, 16, 257–272.
- Distefano, N., and A. Rath (1975), An identification approach to subsurface hydrological systems, *Water Resour. Res.*, 11(6), 1005–1012.
- Doherty, J. (2003), Ground water model calibration using pilot points and regularization, *Groundwater*, 41(2), 170–177.
- Ebel, B., and K. Loague (2006), Physics-based hydrologic-response simulation: Seeing through the fog of equifinality, *Hydrol. Processes*, 20, 2887–2900.
- Ebel, B. A., B. B. Mirus, C. S. Heppner, J. E. VanderKwaak, and K. Loague (2009), First-order exchange coefficient coupling for simulating surface water–groundwater interactions: Parameter sensitivity and consistency with a physics-based approach, *Hydrol. Processes*, 23, 1949–1959, doi:10.1002/hyp.7279.
- Efstratiadis, A., and D. Koutsoyiannis (2010), One decade of multi-objective calibration approaches in hydrological modelling: A review, *Hydrol. Sci. J.*, 55(1), 58–78.
- Efstratiadis, A., I. Nalbantis, A. Koukouvinos, E. Rozos, and D. Koutsoyiannis (2008), HYDROGEIOS: A semi-distributed GIS-based hydrological model for modified river basins, *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 12, 989–1006.
- Emsellem, Y., and G. de Marsily (1971), An automatic solution for the inverse problem, *Water Resour. Res.*, 7(5), 1264–1283.
- Flipo, N., S. Even, M. Poulin, and E. Ledoux (2005), Hydrological part of CaWaQS (Catchment Water Quality Simulator): Fitting on a small sedimentary basin, *Verh. Int. Verein. Limnol.*, 29(2), 768–772.
- Flipo, N., S. Even, M. Poulin, S. Théry, and E. Ledoux (2007a), Modeling nitrate fluxes at the catchment scale using the integrated tool CaWaQS, *Sci. Total Environ.*, 375, 69–79, doi:10.1016/j.scitotenv.2006.12.016.
- Flipo, N., N. Jeannée, M. Poulin, S. Even, and E. Ledoux (2007b), Assessment of nitrate pollution in the Grand Morin aquifers (France): Combined use of geostatistics and physically-based modeling, *Environ. Pollut.*, 146(1), 241–256, doi:10.1016/j.envpol.2006.03.056.
- Freeze, R. (1971), Three-dimensional, transient, saturated-unsaturated flow in a groundwater basin, *Water Resour. Res.*, 7(2), 347–366.
- Frind, E., and G. F. Pinder (1973), Galerkin solution of the inverse problem for aquifer transmissivity, *Water Resour. Res.*, 9(5), 1397–1410.
- Furman, A. (2008), Modeling coupled surface-subsurface flow processes: A review, *Vadose Zone J.*, 7(2), 741–756, doi:10.2136/vzj2007.0065.
- Garcia, L. A., and A. Shigidib (2006), Using neural networks for parameter estimation in ground water, *J. Hydrol.*, 318, 215–231.
- Gill, M., Y. Kaheil, A. Khalil, M. McKee, and L. Bastidas (2006), Multiobjective particle swarm optimization for parameter estimation in hydrology, *Water Resour. Res.*, 42, W07417, doi:10.1029/2005WR004528.
- Girard, G., E. Ledoux, and J.-P. Villeneuve (1980), An integrated rainfall, surface and underground runoff model, *Houille Blanche*, 4/5, 315–320.
- Giudici, M., and C. Vassena (2006), dsm.f90: A computer code for the solution of an inverse problem of ground water hydrology by the differential system method, *Comput. Geosci.*, 32, 1709–1719.
- Giudici, M., and C. Vassena (2008), Spectral analysis of the balance equation of ground water hydrology, *Trans. Porous Media*, 72, 171–178.
- Giudici, M., G. Morossi, G. Parravicini, and G. Ponzini (1995), A new method for the identification of distributed transmissivities, *Water Resour. Res.*, 31(8), 1969–1988.
- Giudici, M., F. Delay, G. de Marsily, G. Parravicini, G. Ponzini, and A. Rosazza (1998), Discrete stability of the differential system method evaluated with geostatistical techniques, *Stoch. Hydrol. Hydraul.*, 12(3), 191–204.
- Goderniaux, P., S. Brouyre, H. Fowler, S. Blenkinsop, R. Therrien, P. Orban, and A. Dassargues (2009), Large scale surface-subsurface hydrological model to assess climate change impacts on groundwater reserves, *J. Hydrol.*, 373(1–2), 122–138.
- Golaz-Cavazzi, C. (1999), Modélisation hydrologique à l'échelle régionale appliquée au bassin du Rhône, PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Paris.

- Gomez, E., et al. (2003), Un outil de modélisation intégrée du transfert des nitrates sur un système hydrologique: Application au bassin de la Seine, *Houille Blanche*, 3-2003, 38–45.
- Gomez-Hernandez, J., A. Sahuquillo, and J. Capilla (1997), Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data—I. theory, *J. Hydrol.*, 203, 162–174.
- Gonzalez, R. V., M. Giudici, G. Ponzini, and G. Parravicini (1997), The differential system method for the identification of transmissivity and storativity, *Transp. Porous Media*, 26, 339–371.
- Gupta, H., S. Sorooshian, and P. Yapo (1998), Toward improved calibration of hydrologic models: Multiple and noncommensurable measures of information, *Water Resour. Res.*, 34(4), 751–763, doi:10.1029/97WR03495.
- Habets, F., P. Etchevers, C. Golaz, E. Leblois, E. Ledoux, E. Martin, J. Noilhan, and C. Ottlé (1999), Simulation of the water budget and the river flows of the Rhône basin, *J. Geophys. Res.*, 104(D24), 31,145–31,172.
- Hefez, E., U. Shamir, and J. Bear (1975), Identifying the parameters of an aquifer cell model, *Water Resour. Res.*, 11(6), 993–1004.
- Heidari, M., and S. R. Ranjithan (1998), A hybrid optimization approach to the estimation of distributed parameters in two-dimensional confined aquifers, *J. Am. Water Res. Assoc.*, 34(4), 909–920.
- Hendricks Franssen, H., A. Alcolea, M. Riva, M. Bakr, N. van der Wiel, F. Stauffer, and A. Guadagnini (2009), A comparison of seven methods for the inverse modelling of groundwater flow. Application to the characterisation of well catchments, *Adv. Water Resour.*, 32, 851–872.
- Hernandez, A., S. Neuman, A. Guadagnini, and J. Carrera (2003), Conditioning mean steady state flow on hydraulic head and conductivity through geostatistical inversion, *Stoch. Environ. Res. Risk Assess.*, 17, 329–338.
- Heuvelmans, G., B. Muys, and J. Feyen (2006), Regionalisation of the parameters of a hydrological model: Comparison of linear regression models with artificial neural nets, *J. Hydrol.*, 319(1–4), 245–265.
- Hoeksema, R., and P. Kitanidis (1985), Comparison of gaussian conditional mean and kriging estimation in the geostatistical solution of the inverse problem, *Water Resour. Res.*, 21(6), 825–836.
- Hundecha, Y., and A. Bárdossy (2004), Modeling of the effect of land use changes on the runoff generation of a river basin through parameter regionalization of a watershed model, *J. Hydrol.*, 292(1–4), 281–295, doi:10.1016/j.jhydrol.2004.01.002.
- Hunt, R., J. Doherty, and M. Tonkin (2007), Are models too simple? Arguments for increased parameterization, *Groundwater*, 45(3), 254–262.
- Jang, J. (1996), Input selection for anfis learning, *IEEE Int. Conf. Fuzzy Syst.*, 2, 1493–1499.
- Karahan, H., and M. T. Ayvaz (2008), Simultaneous parameter identification of a heterogeneous aquifer system using artificial neural networks, *Hydrogeol. J.*, 16, 817–827.
- Kholghi, M., and S. M. Hosseini (2006), Estimation of aquifer transmissivity using kriging, artificial neural network, and neuro-fuzzy models, *J. Spatial Hydrol.*, 6, 68–81.
- Khu, S.-T., H. Madsen, and F. di Pierro (2008), Incorporating multiple observations for distributed hydrologic model calibration: An approach using a multi-objective evolutionary algorithm and clustering, *Adv. Water Resour.*, 31, 1387–1398.
- Kitanidis, P., and E. Vomvoris (1983), A geostatistical approach to the inverse problem in groundwater modeling (steady state) and one-dimensional simulations, *Water Resour. Res.*, 19(3), 677–690.
- Kolditz, O., J. Delfs, C. Bürger, M. Beinhorn, and C. Parkee (2008), Numerical analysis of coupled hydrosystems based on an object-oriented compartment approach, *J. Hydroinf.*, 10, 227–244.
- Kollet, S. J., and R. M. Maxwell (2006), Integrated surface-groundwater flow modeling: A free-surface overland flow boundary condition in a parallel groundwater flow model, *Adv. Water Resour.*, 29, 945–958.
- Korkmaz, S. (2007), Modeling of the flood regimes in coupled stream-aquifer systems, PhD thesis, Ecole des Mines de Paris, Paris.
- Korkmaz, S., E. Ledoux, and H. Önder (2009), Application of the coupled model to the Somme river basin, *J. Hydrol.*, 366(1–4), 21–34, doi:10.1016/j.jhydrol.2008.12.008.
- Kurtulus, B., and N. Flipo (2012), Hydraulic head interpolation using anfis—Model selection and sensitivity analysis, *Comput. Geosci.*, 38(1), 43–51, doi:10.1016/j.cageo.2011.04.019.
- Kurtulus, B., and M. Razack (2007), Evaluation of the ability of an artificial neural network model to simulate the input-output responses of a large karstic aquifer. The La Rochefoucauld (Charente, France), *Hydrogeol. J.*, 15(2), 241–254.
- Kurtulus, B., and M. Razack (2010), Modeling daily discharge responses of a large karstic aquifer using soft computing methods: Artificial neural network and neuro-fuzzy, *J. Hydrol.*, 381, 101–111.
- Kurtulus, B., N. Flipo, P. Goblet, G. Vilain, J. Tournebize, and G. Tallec (2011), Hydraulic head interpolation in an aquifer unit using ANFIS and Ordinary Kriging, *Stud. Comput. Intel.*, 343, 265–276, doi:10.1007/978-3-642-20206-3_18.
- LaVenue, A., B. RamaRao, G. de Marsily, and M. Marietta (1995), Pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields 2. Application, *Water Resour. Res.*, 31(3), 495–516.
- Leblois, E. (2008), Hydro-Logical processing of geographical information—Part one: DEM, Drainage pattern, Rivers, Basins, technical report, 44 pp., Cemagref, Lyon, France, 236 pp.
- Ledoux, E. (1980), Modélisation intégrée des écoulements de surface et des écoulements souterrains sur un bassin hydrologique, PhD thesis, 236 pp., Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Paris.
- Ledoux, E., G. Girard, and J. Villeneuve (1984), Proposition d'un modèle couplé pour la simulation conjointe des écoulements de surface et des écoulements souterrains sur un bassin hydrologique, *Houille Blanche*, 1–2, 101–110.
- Ledoux, E., G. Girard, G. de Marsily, J. Villeneuve, and J. Deschenes (1989), Spatially distributed modeling: Conceptual approach, coupling surface water and groundwater, in *Unsaturated Flow in Hydrologic Modeling—Theory and Practice*, edited by H. J. Morel-Seytoux, pp. 435–454, Kluwer Academic, NATO ASI Ser. C, Norwell, Massachusetts.
- Lemieux, J., and E. Sudicky (2010), Simulation of groundwater age evolution during the Wisconsinian glaciation over the Canadian landscape, *Environ. Fluid Mech.*, 10, 91–102.
- Li, Q., A. Unger, E. Sudicky, D. Kassenaar, E. Wexler, and S. Shikaze (2008), Simulating the multi-seasonal response of a large-scale watershed with a 3D physically-based hydrologic model, *J. Hydrol.*, 357(3–4), 317–336.
- Lin, G.-F., and G.-R. Chen (2006), An improved neural network approach to the determination of aquifer parameters, *J. Hydrol.*, 316, 281–289, doi:10.1016/j.jhydrol.2005.04.023.
- Liu, H., N. Hsu, and T. H. Lee (2009), Simultaneous identification of parameter, initial condition, and boundary condition in groundwater modelling, *Hydrol. Processes*, 23(16), 2358–2367.
- Loague, K., and J. VanderKwaak (2004), Physics-based hydrologic response: Platinum bridge, 1958 Edsel, or useful tool, *Hydrol. Processes*, 18, 2949–2956.
- Madsen, H. (2003), Parameter estimation in distributed hydrological catchment modelling using automatic calibration with multiple objectives, *Adv. Water Resour.*, 26, 205–216.
- Maget, P. (1995), Piézométrie du système aquifère de Beauce—Basses eaux 1994, *Tech. Rep. R 38572*, Bur. de Rech. Geol. et Miner., Orléans, France. [Available at www.brgm.fr.]
- Majdalani, S., and P. Ackerer (2011), Identification of groundwater parameters using an adaptive multiscale method, *Groundwater*, 49(4), 548–559, doi:10.1111/j.1745-6584.2010.00750.x.
- Marcotte, D., and P. Pasquier (2007), Reply to “Comments on steady- and transient-state inversion in hydrogeology by successive flux estimation” by G. Ponzini, M. Giudici and C. Vassena, *Adv. Water Resour.*, 30, 2054–2057.
- Mardhel, V., A. Gravier, J.-Y. Koch-Mathian, C. Nowak, J.-L. Terreyre, M. Raguet, and C. Garnier (2006), Cartographie de la vulnérabilité simplifiée des eaux souterraines du bassin Seine-Normandie et application aux sites BASOL, in *Proceedings of International Symposium Darcy 2006—Aquifers Systems Management*, Dijon, France, pp. 15–25. [Available at http://www.brgm.fr/brgm/aih/fichier/actes/theme4_p38_63.pdf.]
- Mazi, K., A. D. Koussis, P. J. Restrepo, and D. Koutsoyiannis (2004), A groundwater-based, objective-heuristic parameter optimisation method for a precipitation-runoff model and its application to a semi-arid basin, *J. Hydrol.*, 290(3–4), 243–258, doi:10.1016/j.jhydrol.2003.12.006.
- McLaughlin, D., and L. Townley (1996), A reassessment of the groundwater inverse problem, *Water Resour. Res.*, 32(5), 1131–1161.
- Medina, A., and J. Carrera (2003), Geostatistical inversion of coupled problems: dealing with computational burden and different types of data, *J. Hydrol.*, 281, 251–264.
- Meier, P., A. Medina, and J. Carrera (2001), Geostatistical inversion of cross-hole pumping tests for identifying preferential flow channels within a shear zone, *Groundwater*, 39(1), 10–17.
- Mirus, B. B., B. A. Ebel, K. Loague, and B. C. Wemple (2007), Simulated effect of a forest road on near-surface hydrologic response: Redux, *Earth Surf. Processes Landforms*, 32, 126–142.
- Mirus, B. B., K. Loague, J. E. VanderKwaak, S. K. Kampf, and S. J. Burges (2009), A hypothetical reality of Tarrawarra-like hydrologic response, *Hydrol. Processes*, 23, 1093–1103.

- Monteil, C., N. Flipo, M. Poulin, F. Habets, M. Krimissa, and E. Ledoux (2010), Assessing the contribution of the main aquifer units of the Loire basin to river discharge during low flows, in *Proceedings of XVIII International Conference on Computational Methods in Water Resources, Barcelona*. [Available at <http://congress.cimne.com/cmwr2010/Proceedings/docs/p71.pdf>.]
- Mukhopadhyay, A. (1999), Spatial estimation of transmissivity using artificial neural network, *Groundwater*, 37, 458–464.
- Nalbantis, I., A. Efstratiadis, E. Rozos, M. Kopsiafti, and D. Koutsoyiannis (2011), Holistic versus monomeric strategies for hydrological modelling of human-modified hydrosystems, *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 15(3), 743–758, doi:10.5194/hess-15-743-2011.
- Nash, J., and J. Sutcliffe (1970), River flow forecasting through conceptual models. Part I, A discussion of principles, *J. Hydrol.*, 10, 282–290.
- Navarro, A. (1977), A modified optimization method of estimating aquifer parameters, *Water Resour. Res.*, 13(6), 935–939.
- Neuman, S., and S. Yakowitz (1979), A statistical approach for the inverse problem of aquifer hydrology 1. Theory, *Water Resour. Res.*, 15(4), 845–860.
- Neuman, S., G. Fogg, and E. Jacobson (1980), A statistical approach to the inverse problem of aquifer hydrology: 2. Case study, *Water Resour. Res.*, 16(1), 33–58.
- Nutbrown, D. (1975), Identification of parameters in a linear equation of groundwater flow, *Water Resour. Res.*, 11(4), 581–588.
- Panday, S., and P. S. Huyakorn (2004), A fully coupled physically-based spatially-distributed model for evaluating surface/subsurface flow, *Adv. Water Resour.*, 27, 361–382.
- Pasquier, P., and D. Marcotte (2006), Steady- and transient-state inversion in hydrogeology by successive flux estimation, *Adv. Water Resour.*, 29(12), 1934–1952.
- Poeter, E., and M. Hill (1997), Inverse models: A necessary next step in ground-water modeling, *Groundwater*, 35(2), 250–260.
- Polus, E., N. Flipo, C. de Fouquet, and M. Poulin (2011), Geostatistics for assessing the efficiency of distributed physically-based water quality model. Application to nitrates in the Seine River, *Hydrol. Processes*, 25(2), 217–233, doi:10.1002/hyp.7838.
- Ponzini, G., and A. Lozej (1982), Identification of aquifer transmissivities: The comparison model method, *Water Resour. Res.*, 18(3), 597–622.
- Ponzini, G., Giudici, and C. M., Vassena (2007), Comments on “Steady- and transient-state inversion in hydrogeology by successive flux estimation” by P. Pasquier and D. Marcotte, *Adv. Water Resour.*, 30(9), 2051–2053.
- Quintana-Seguí, P., P. L. Moigne, Y. Durand, E. Martin, F. Habets, M. Bailon, C. Canellas, L. Franchisteguy, and S. Morel (2008), Analysis of near-surface atmospheric variables: Validation of the SAFRAN analysis over France, *J. Appl. Meteorol. Climatol.*, 47, 92–107.
- RamaRao, B., A. LaVenue, G. de Marsily, and M. Marietta (1995), Pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields 1. Theory and computational experiments, *Water Resour. Res.*, 31(3), 475–493.
- RamaRao, B., A. LaVenue, G. de Marsily, and M. Marietta (2000), Reply, *Water Resour. Res.*, 36(9), 2799–2803.
- Refsgaard, J. C. (1997), Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models, *J. Hydrol.*, 198, 69–97.
- Refsgaard, J., and H. Henriksen (2004), Modelling guidelines—Terminology and guiding principles, *Adv. Water Resour.*, 27(1), 71–82.
- Renard, F., and N. Jeannée (2008), Estimating transmissivity fields and their influence on flow and transport: The case of champagne mounts, *Water Resour. Res.*, 44, W11414, doi:10.1029/2008WR007033.
- Roth, C., J.-P. Chilès, and C. de Fouquet (1998), Combining geostatistics and flow simulators to identify transmissivity, *Adv. Water Resour.*, 21, 555–565.
- Rozos, E., A. Efstratiadis, I. Nalbantis, and D. Koutsoyiannis (2004), Calibration of a semi-distributed model for conjunctive simulation of surface and groundwater flows, *Hydrol. Sci. J.*, 49(5), 819–842.
- Rubin, Y., and G. Dagan (1987), Stochastic identification of transmissivity and effective recharge in steady groundwater flow: 1. Case study, *Water Resour. Res.*, 23(7), 1193–1200.
- Sadehipour, J., and W. W.-G. Yeh (1984), Parameter identification of groundwater aquifer models: A generalized least squares approach, *Water Resour. Res.*, 20(7), 971–979.
- Sagar, B., S. Yakowitz, and L. Duckstein (1975), A direct method for the identification of the parameters of dynamic nonhomogeneous aquifers, *Water Resour. Res.*, 11(4), 563–570.
- Saleh, F., N. Flipo, F. Habets, A. Ducharne, L. Oudin, P. Vienneot, and E. Ledoux (2011), Modeling the impact of in-stream water level fluctuations on stream-aquifer interactions at the regional scale, *J. Hydrol.*, 400(3–4), 490–500, doi:10.1016/j.jhydrol.2011.02.001.
- Samani, N., M. Gohari-Moghadam, and A. Safavi (2007), A simple neural network model for the determination of aquifer parameters, *J. Hydrol.*, 340, 1–11.
- Schellart, A., S. Tait, and R. Ashley (2010), Towards quantification of uncertainty in predicting water quality failures in integrated catchment model studies, *Water Res.*, 44(13), 3893–3904.
- Shrestha, R. R., and M. Rode (2008), Multi-objective calibration and fuzzy preference selection of a distributed hydrological model, *Environ. Modell. Software*, 23, 1384–1395.
- Sun, N.-Z., and W. W.-G. Yeh (1985), Identification of parameter structure in groundwater inverse problem, *Water Resour. Res.*, 21(6), 869–883.
- Sun, N.-Z., and W. W.-G. Yeh (1992), A stochastic inverse solution for transient groundwater flow: Parameter identification and reliability analysis, *Water Resour. Res.*, 28(12), 3269–3280, doi:10.1029/92WR00683.
- Therrien, R., R. McLaren, E. Sudicky, and S. Panday (2010), HydroGeoSphere: A three-dimensional numerical model describing fully-integrated subsurface and surface flow and solute transport, technical report, Univ. of Waterloo, Canada, 483 pp. incl. Appendix. [Available at <http://hydrogeosphere.org/hydrosphere.pdf>.]
- Thierion, C., F. Habets, E. Ledoux, P. Vienneot, E. Martin, S. Queguiner, P. Ackerer, S. Majdalani, E. Lebouis, and S. Lecluse (2010), Modelling the surface water and ground water system of the Upper Rhine graben, in *Proceedings of XVIII International Conference on Computational Methods in Water Resources, Barcelona*, edited by J. Carrera. [Available at <http://congress.cimne.com/cmwr2010/Proceedings/docs/p26.pdf>.]
- VanderKwaak, J. E., and K. Loague (2001), Hydrologic-response simulations for the R-5 catchment with a comprehensive physics-based model, *Water Resour. Res.*, 37, 999–1013.
- Vassena, C., C. Durante, M. Giudici, and G. Ponzini (2008), The importance of observations on fluxes to constrain ground water model calibration, *Phys. Chem. Earth*, 33, 1105–1110.
- Vemuri, V., and W. J. Karplus (1969), Identification of nonlinear parameters of ground water basins by hybrid computation, *Water Resour. Res.*, 5(1), 172–185.
- Verley, F., F. Brunson, P. Verjus, and M. Cholez (2003), Nappe de Beauce—Piézométrie hautes eaux 2002, technical report, DIREN Centre et Ile-de-France, Orleans, France.
- Weill, S., E. Mouche, and J. Patin (2009), A generalized Richards equation for surface/subsurface flow modelling, *J. Hydrol.*, 366(1–4), 9–20.
- Wen, X. H., J. E. Capilla, C. V. Deutsch, J. J. Gómez-Hernández, and A. S. Cullick (1999), A program to create permeability fields that honor single-phase flow rate and pressure data, *Comput. Geosci.*, 25(3), 217–230.
- Wen, X.-H., C. Deutsch, and A. Cullick (2002), Construction of geostatistical aquifer models integrating dynamic flow and tracer data using inverse technique, *J. Hydrol.*, 255, 151–168.
- Woodbury, A., and L. Smith (1987), Simultaneous inversion of hydrogeologic and thermal data 1. Theory and application using hydraulic head data, *Water Resour. Res.*, 23(8), 1586–1606.
- Yeh, W.-G. (1986), Review of parameter identification in groundwater hydrology: The inverse problem, *Water Resour. Res.*, 22(2), 95–108.
- Yeh, W.-G., and Y. Yoon (1981), Aquifer parameter identification with optimum dimension in parametrization, *Water Resour. Res.*, 17(3), 664–672.
- Yeh, W. W.-G., and G. W. Tauxe (1971), Optimal identification of aquifer diffusivity using quasilinearization, *Water Resour. Res.*, 7(4), 955–962.
- Zhang, X., R. Srinivasan, K. Zhao, and M. V. Liew (2009), Evaluation of global optimization algorithms for parameter calibration of a computationally intense hydrologic model, *Hydrol. Processes*, 23, 430–441.
- Zimmerman, D., et al. (1998), A comparison of seven geostatistically based inverse approaches to estimate transmissivities for modeling advective transport by groundwater flow, *Water Resour. Res.*, 34(6), 1373–1413.

C. de Fouquet, N. Flipo, and M. Poulin, Geosciences Department, MINES ParisTech, 35 rue Saint-Honoré, 77305 Fontainebleau, France. (chantal.de_fouquet@mines-paristech.fr; nicolas.flipo@mines-paristech.fr)
M. Krimissa and C. Monteil, Laboratoire National d’Hydraulique et Environnement, EDF R&D, 6 quai Watier, 78401 Chatou, France.

- D.2 Kurtulus and Flipo (2012)** Hydraulic head interpolation using anfis - Model selection and sensitivity analysis. Computers and Geosciences 38(1), 43–51



Hydraulic head interpolation using ANFIS—model selection and sensitivity analysis

Bedri Kurtulus^{a,b}, Nicolas Flipo^{a,*}

^a MINES ParisTech, Geosciences Department, 35 rue Saint-Honoré, 77305 Fontainebleau, France

^b Muğla University, Geological Engineering Department, 48000 Kotecli Muğla, Turkey

ARTICLE INFO

Article history:

Received 7 October 2010

Received in revised form

18 February 2011

Accepted 26 April 2011

Available online 20 May 2011

Keywords:

Spatial interpolation

ANFIS

Sensitivity analysis

Hydraulic head

Hydrogeology

ABSTRACT

The aim of this study is to investigate the efficiency of ANFIS (adaptive neuro fuzzy inference system) for interpolating hydraulic head in a 40-km² agricultural watershed of the Seine basin (France). Inputs of ANFIS are Cartesian coordinates and the elevation of the ground. Hydraulic head was measured at 73 locations during a snapshot campaign on September 2009, which characterizes low-water-flow regime in the aquifer unit. The dataset was then split into three subsets using a square-based selection method: a calibration one (55%), a training one (27%), and a test one (18%).

First, a method is proposed to select the best ANFIS model, which corresponds to a sensitivity analysis of ANFIS to the type and number of membership functions (MF). Triangular, Gaussian, general bell, and spline-based MF are used with 2, 3, 4, and 5 MF per input node. Performance criteria on the test subset are used to select the 5 best ANFIS models among 16. Then each is used to interpolate the hydraulic head distribution on a (50 × 50)-m grid, which is compared to the soil elevation. The cells where the hydraulic head is higher than the soil elevation are counted as “error cells.” The ANFIS model that exhibits the less “error cells” is selected as the best ANFIS model. The best model selection reveals that ANFIS models are very sensitive to the type and number of MF. Finally, a sensibility analysis of the best ANFIS model with four triangular MF is performed on the interpolation grid, which shows that ANFIS remains stable to error propagation with a higher sensitivity to soil elevation.

© 2011 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Hydraulic head mapping is useful in many environmental applications. For instance, estimates of the hydraulic head distribution are frequently used to determine the capture zone of pumping wells. Hydraulic head maps are also an important tool for earth dam monitoring (Rivest et al., 2008). Another use of the hydraulic head distribution is to initialize distributed models, which are critical tools nowadays for managing water resources at the basin scale (Billen et al., 2007; Flipo et al., 2007a,b; Ledoux et al., 2007).

Understanding the temporal and spatial variations of the depth to groundwater is a prerequisite to achieving sustainable water use in basin. Local measurements of water table levels are available, but what is needed is groundwater surfaces based on these measurements. A technique often used in earth sciences and especially in hydrogeology is kriging (Abedini et al., 2008; Brochu and Marcotte, 2003; Buchanan and Triantafyllis, 2009; Flipo et al., 2007a; Lyon et al., 2006; Pardo-Igúzquiza et al., 2009; Renard and Jeanne, 2008; Sun et al., 2009; Theodossiou

and Latinopoulos, 2006). Few authors have compared the efficiency of different interpolation techniques with kriging and cokriging (Ahmadi and Sedghamiz, 2008; Boezio et al., 2006; Hoeksema et al., 1989; Pardo-Igúzquiza and Chica-Olmo, 2007). Results of these studies show that, for an unconfined aquifer, kriging with a digital elevation model (DEM) of the ground surface as an external drift is the best hydraulic head interpolation method (Desbarats et al., 2002; Rivest et al., 2008).

In recent years hydrologists have started to use soft computing and especially artificial neural networks (ANN) to transform an input signal—precipitation—to an output signal—discharge at the outlet of a catchment—with success (Johannet et al., 2007; Kurtulus and Razack, 2007; Minns and Hall, 2004). Garcia and Shigidib (2006), Karahan and Ayvaz (2008), and Samani et al. (2007) used ANN to estimate aquifer parameters. Several authors used ANN to assess groundwater quality (Kuo et al., 2004; Tutmez et al., 2006) or to solve groundwater remediation issues (Yan and Minsker, 2006). Morshed and Kaluarachchi (1998) performed a very informative study on the efficiency of ANN for flow and transport simulations in porous media. Abrahart et al. (2004) published an excellent synthesis on different hydrological applications of ANN.

Nevertheless ANN has not been used to interpolate hydraulic head distribution in aquifers, but adaptive neuro-fuzzy inference

* Corresponding author.

E-mail address: Nicolas.Flipo@mines-paristech.fr (N. Flipo).

systems (ANFIS) have been used successfully to achieve this purpose (Kholghi and Hosseini, 2009; Kurtulus et al., 2011; Kurtulus and Razack, 2010; Lin and Chen, 2004). ANFIS has also been used successfully to estimate groundwater parameters (Ayyaz et al., 2007), to predict reservoir level (Chang et al., 2005; Chang and Chang, 2006) and river discharge (Chidthong et al., 2009; El-Shafie et al., 2007; Firat and Gungor, 2007, 2008; Firat, 2008; Hong and White, 2009; Luchetta and Manetti, 2003; Nayak et al., 2004; Wang et al., 2009), for groundwater management (Chu and Chang, 2009; Firat et al., 2009; Yurdusev and Firat, 2009), and for assessing pollutant fluxes at the basin scale (Bárdossy et al., 2003; Marcé et al., 2004). ANFIS was also used to model the hydrological cycle (Bárdossy, 1996).

Many studies report that ANFIS outperforms ANN (El-Shafie et al., 2007; Firat, 2008; Nayak et al., 2004; Pai et al., 2009; Wang et al., 2009), although very few studies focus on ANFIS uncertainty analysis. The few sensitivity analyses concern data selection in terms of input variables or of dataset splitting among training, validation, and test subsets (Marcé et al., 2004; Sahoo et al., 2005). Only Zanchettin et al. (2005) analyzed the ANFIS structure itself and pointed out the crucial step of membership function (MF) shaping.

As understanding uncertainties due to methods are of primary importance (Beven, 1989; Ebel and Loague, 2006; Polus et al., 2011), this paper aims at better characterizing ANFIS uncertainties in hydrogeology. In this paper different ANFIS models with different MF (Gaussian, bell-shaped, triangular, and spline-based) are tested for a low-water-flow regime. After the best model is selected, the interpolation robustness of ANFIS on a (50 × 50)-m grid is assessed by slightly perturbing either the coordinates of the center of the interpolation grid (± 5 and 10 m) or the elevation of the soil (± 1 , 2, and 3 m).

2. Experimental site and data

With an area of 104 km², the Orgeval experimental basin (Fig. 1) is located 70 km east of Paris (Ancitil et al., 2009; Flipo et al., 2007c). Agriculture takes place on 80% of its surface, while the remaining 20% is forested. The average annual air temperature is 9.7 °C. The annual mean rainfall is 706 mm, and the annual mean potential evaporation is 592 mm. The hydrological behavior of the

Orgeval basin is influenced by the aquifer system, which is composed of two main geological formations: the Oligocene (Rupelian limestone, Fig. 1) and the Eocene (from Priabonian to Ypresian claystones, Fig. 1). These two aquifer units are separated by a clayey aquitard. Most of the basin is covered with tableland loess about 2–5 m thick. These unconsolidated deposits are essentially composed of sand and loam lenses of low permeability, but they seem to be more or less connected to the Rupelian limestone.

The basin is relatively flat, with slopes increasing near the small valley at the river mouth. Eighty percent of the territory spans between 130 and 190 m above mean sea level (Fig. 2). In this work we will focus on hydraulic head distribution in the eastern part of the basin, covering the Avenelles watershed (Fig. 1).

The datasets characterizing the low-water-flow regime of 2009 (Fig. 1) are composed of three different types of data. The first consists in three piezometers that are permanently sampled. The second consists in water levels measured in wells. The wells were sampled on 29 September 2009 during a snapshot campaign aiming at characterizing the low-water-flow regime. This campaign follows another one aimed at characterizing the high-water-flow regime of 2009 (Kurtulus et al., 2010, 2011). Our goal is to determine the hydraulic head distribution of the subsurface aquifer unit—silt connected to the Rupelian limestone. Due to the complex geometry of the aquifer system at the outlet of the Avenelles basin and in the southeastern part of the area of interest (Fig. 1), we needed to complete the piezometers and wells dataset in this part of the domain of interest. To do so we used a (50 × 50)-m DEM of the top of the Priabonian mudstone. The elevation of the limit between Priabonian mudstone and Rupelian limestone was then implemented inside the datasets as springs that are observed in the valleys. These subsets make up the third dataset mentioned. Finally, the overall datasets are composed of 73 hydraulic head measurements for the low-water-flow regime.

3. ANFIS

3.1. Theoretical reminders

ANFIS (Firat and Gungor, 2007; Jang, 1993, 1995, 1996; Pratihari, 2008; Takagi and Sugeno, 1985; Wang et al., 2009) is a modeling

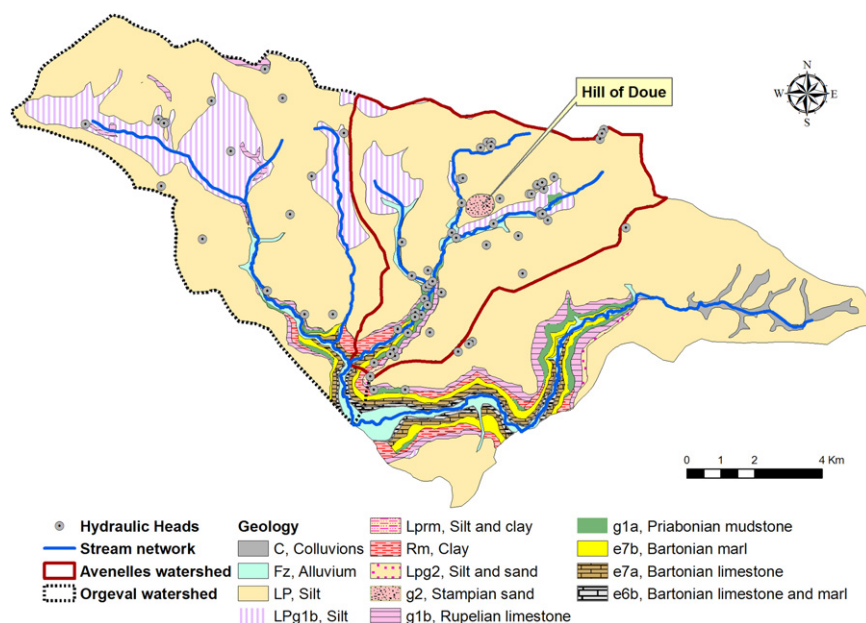


Fig. 1. Geological map of the Orgeval watershed and location of observed hydraulic heads.

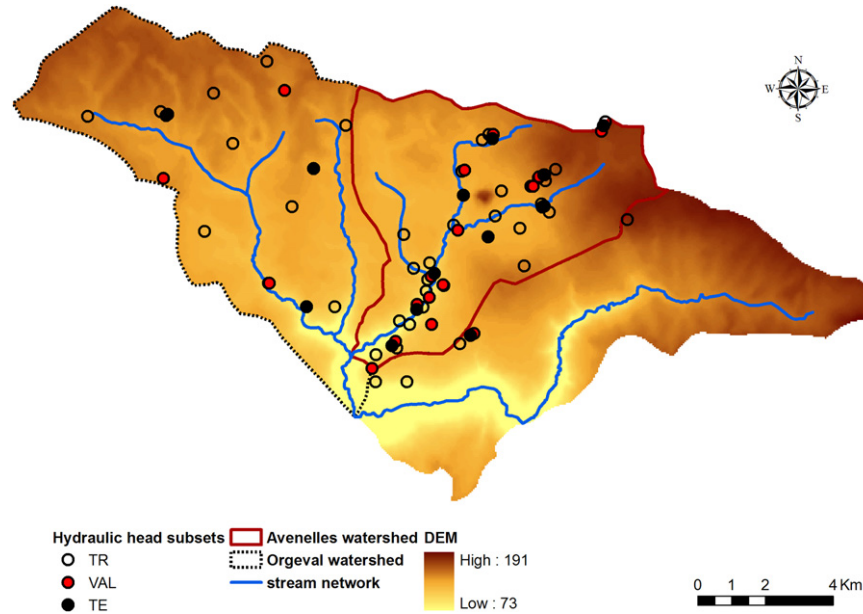


Fig. 2. DEM of the Orgeval basin. Location of piezometers belonging to training, validation, and test subsets.

technique that assumes that input and output data are ill-defined with uncertainty that cannot be exactly assessed with probability theory based on two-valued logic. It uses fuzzy set theory, first proposed by Zadeh (1965). A fuzzy set is a set of elements with an imprecise (vague) boundary (Pratihari, 2008). A fuzzy set does not have a crisp boundary. That is, the transition from “belonging to the set” to “not belonging to the set” is gradual and is characterized by membership functions. A fuzzy set $A(x)$ is then represented by two things—the constituent elements x and their associated membership values $\mu_A(x)$ (that is, their degree of belongingness),

$$A(x) = \{(x, \mu_A(x)), x \in X\}, \quad (1)$$

where X is the universal set consisting of all possible elements. The membership function μ_A ranges between 0 and 1. If the value of the membership function is restricted to either 0 and 1, the fuzzy set is then reduced to a classical crisp set with a known boundary. As stated by Jang (1995), the fuzziness does not come from the randomness of the constituent members of the sets, but from the uncertain and imprecise nature of the abstract thoughts and concepts.

In ANFIS the relationship between input and output is expressed in the form of if–then rules. ANFIS used for the present work is based on the Sugeno fuzzy model (Takagi and Sugeno, 1985), which formalizes a systematic approach to generating fuzzy rules from an input–output dataset. A typical fuzzy rule in a Sugeno fuzzy model has the following format: If $x \in A$ and $y \in B$ then $z = f(x, y)$, where A and B are fuzzy sets in the antecedent and $f(x, y)$ is a crisp function in the consequent. Usually f is a polynomial function.

The architecture of the ANFIS is composed of five layers (Fig. 3). Each layer has a specific function. The first layer generates membership grades. This means that it defines the parameter of the membership functions. For instance, let consider a first-order Sugeno fuzzy inference system that contains two rules:

Rule 1: If $X \in A_1$ and $Y \in B_1$ then $f_1 = p_1x + q_1y + r_1$;

Rule 2: If $X \in A_2$ and $Y \in B_2$ then $f_2 = p_2x + q_2y + r_2$;

$p_1, q_1, r_1, p_2, q_2, r_2$ are defined in the first layer of the ANFIS (Fig. 3).

Each node i of layer 2 calculates the firing strength w_i of the i th rule via multiplication, $w_i = \mu_{A_i}(x)\mu_{B_i}(y)$.

Node i in layer 3 calculates the ratio of the i th rule's firing strength divided by the total amount of all firing strengths: $\bar{w}_i = w_i / \sum_j w_j$.

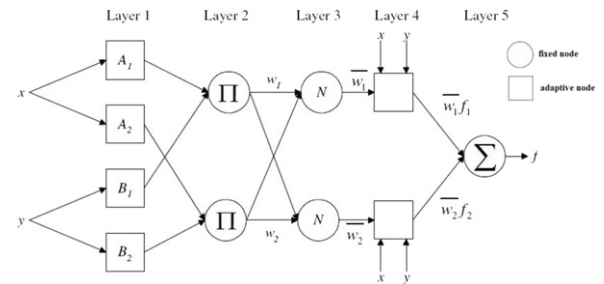


Fig. 3. ANFIS architecture for two inputs x, y . Layer 1: Generates membership grades. Layer 2: Fuzzy rules. Layer 3: Calculates weights of rules named firing strengths. Layer 4: Product of the normalized firing strengths. Layer 5: Fuzzy results transformed into a traditional output by summation.

Node i in layer 4 calculates the contribution (weight) of the i th rule (which calculates $f_i = p_i x + q_i y + r_i$ from input data) toward the overall output via multiplication: $\bar{W}_i = \bar{w}_i f_i$.

Finally, layer 5 is made with a single node that computes the overall output as the summation of the contribution from each rule: $f(x, y) = \sum_i \bar{W}_i = \sum_i \bar{w}_i f_i$.

ANFIS uses a hybrid learning algorithm that combines the back-propagation gradient descent and least-squares methods to create a fuzzy inference system whose MF are iteratively adjusted according to a given set of input and output data (Jang, 1993). For each iteration, the back-propagation method involves minimization of an objective function using the steepest-gradient-descent approach, in which the network parameters are adjusted by moving a small step in the direction of negative gradient. The iterations are repeated until a convergence criterion or a specified number of iterations is achieved. It has the advantage of allowing the extraction of fuzzy rules from numerical data and adaptively constructs a rule base.

3.2. Implementation of ANFIS

The neuro fuzzy model was developed using the ANFIS procedures of MATLAB (Demuth and Beale, 2003). In this study, a code is written in Matlab 7.0 for ANFIS using appropriate functions to calculate the best performance of the methods (Kurtulus et al., 2010, 2011). Input data are XY coordinates of piezometers plus the elevation of the ground. Hydraulic head is the ANFIS output.

Before the model can be used to interpolate unknown outputs (hydraulic heads), its actual predictive performance must be tested by comparing outputs estimated by the calibrated models with known outputs. At each phase (training, validation), the ANFIS performance is measured by the determination of the coefficient of goodness of fit, R^2 , and the root-mean-square error (RMSE).

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (Z_i^*(x) - Z_i(x))^2} \quad (2)$$

where $Z_i^*(x)$ are the estimates at location x , and $Z_i(x)$ are the sampled water levels at location x .

Contrary to Kurtulus et al. (2010), ANFIS is run on the low-water-flow regime (Fig. 1). The dataset is divided into three subsets: a training one, a validation one, and a test one. Table 1 provides a statistical summary of each datasets.

Input data are preprocessed to obtain input vectors for which coordinates are in the same range of variations. ANFIS is run with variables that are reduced and centered. This means that each coordinate x_i of the vector X is transformed to the coordinate y_i of Y . Each coordinate (i) of the transformed variable Y is calculated as

$$y_i = \frac{x_i - \bar{X}}{\sigma_X} \quad (3)$$

where $\bar{X}$ is the average of vector X coordinates and σ_X the standard deviation.

The selection of appropriate input parameters is a complex task. The first step is to determine the number of training and validation data. This selection is done iteratively to obtain the most similar training, validation, and test subsets (Heuvelmans et al., 2006) in terms of high values as well as concerning the statistical distribution:

- The area of interest is divided into four squares of equal size.
- If a square contains four points, then two are selected for the training subset, one for the validation subset, and one for the test subset. If not, the square is divided into four squares of equal size and so on.

The aim of the paper is to select the best interpolator for hydraulic head among 16 models and not to perform a sensitivity analysis on input data selection. Thus only one partitioning of the dataset is used in the remainder of the paper: 40 points are assigned to the training subset (55%), 20 points are assigned to the validation subset (27%), and the remaining 13 points to the test subset (18%). The percentage of distribution among the three subsets is consistent with Chen et al. (2006) and Kurtulus et al. (2010, 2011).

3.3. Selection of the best ANFIS model—sensitivity to membership functions

To build an ANFIS model, the first step is to select the type and number of membership functions (MFs) for the first layer of the

Table 1
Statistics summary of the different subsets.

	TR	VAL	T
N	40	20	13
Min [m]	106.00	112.00	109.62
Max [m]	178.25	177.05	177.80
Mean [m]	138.92	138.95	139.65
Std [m]	17.79	16.31	19.10

Notes. N : Number of data; Tr: Training; Val: Validation; T: Test data subsets. Min: Minimum; Max: Maximum; Std: Standard deviation.

model (Fig. 3). In this work we have tested the sensitivity of the ANFIS model to MF of four different types: Gaussian (MF_{gauss}), bell-shaped (MF_{gbell}), triangular (MF_{tri}), and spline-based (MF_{pi}), also called Pi due to its shape (see equations 4, 5, 6 and 7, respectively). In the rest of the paper MF_i^j defines an ANFIS model based on MF of type i using j MF per input data node.

$$f(x, \sigma, c) = e^{-(x-c)^2 / 2\sigma^2} \quad (4)$$

$$f(x, a, b, c) = \frac{1}{1 + \left| \frac{x-c}{a} \right|^{2b}} \quad (5)$$

$$f(x, a, b, c) = \begin{cases} 0, & x \leq a \\ \frac{x-a}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ \frac{c-x}{c-b}, & b \leq x \leq c \\ 0, & c \leq x \end{cases} \quad (6)$$

$$f(x, a, b, c, d) = \begin{cases} 0, & x \leq a \\ 2 \left(\frac{x-a}{b-a} \right)^2, & a \leq x \leq \left(\frac{a+b}{2} \right) \\ 1 - 2 \left(\frac{x-b}{b-a} \right)^2, & \left(\frac{a+b}{2} \right) \leq x \leq b \\ 1, & b \leq x \leq c \\ 1 - 2 \left(\frac{x-c}{d-c} \right)^2, & c \leq x \leq \left(\frac{c+d}{2} \right) \\ 2 \left(\frac{x-d}{d-c} \right)^2, & \left(\frac{c+d}{2} \right) \leq x \leq d \\ 0, & d \leq x \end{cases} \quad (7)$$

Fig. 4 defines the method used to select an ANFIS model, which is derived from Kurtulus et al. (2010). ANFIS models based on different types of MF are run with 2, 3, 4, and 5 MF for 4000 iterations for each node of input data. Iteration and MF numbers are selected using an early stopping criterion that is the minimum

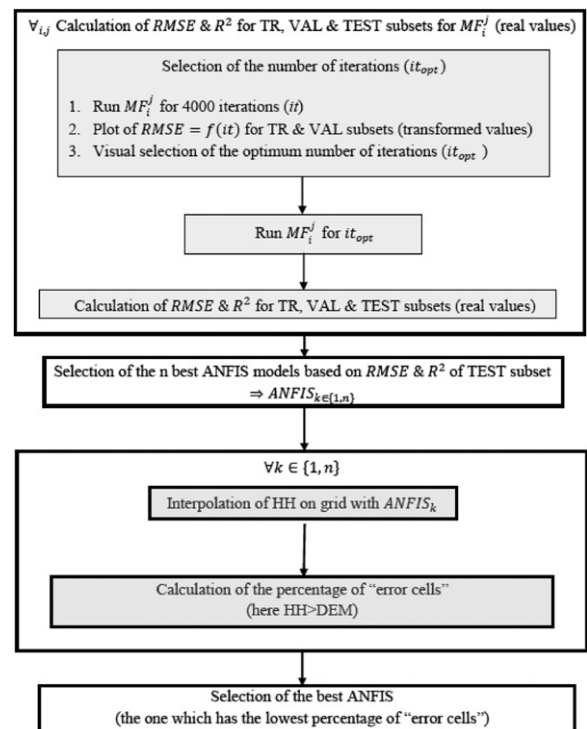


Fig. 4. Flow chart of the best ANFIS model selection. HH: hydraulic head.

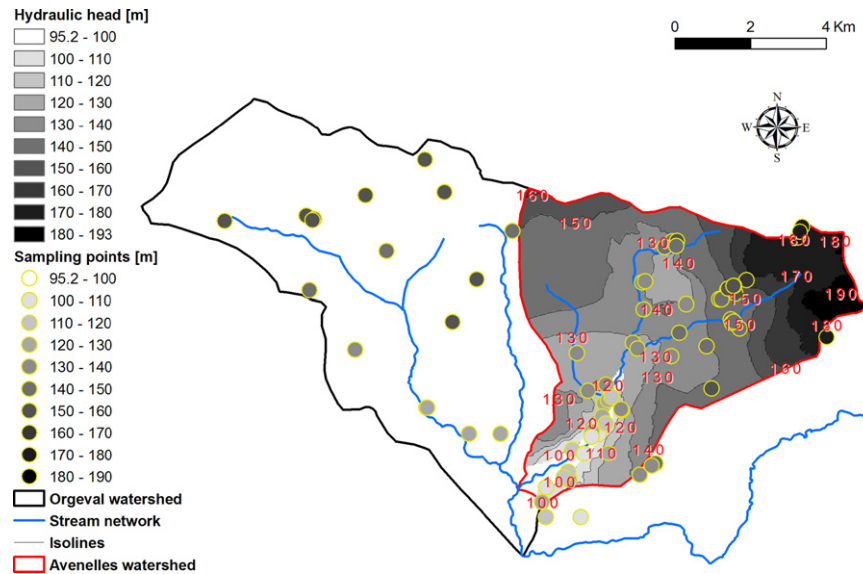


Fig. 5. Interpolated hydraulic head distribution with MF_{tri}^4 .

of RMSE for both training and validation. Then the test performance is used to select the 5 best ANFIS models among 16.

In order to select the best model, each one was then used to interpolate the hydraulic head distribution on a (50×50) -m grid. For each cell of each model's output, the hydraulic head is compared to the elevation of the soil. As the basin of interest does not have artesian springs, the cells where the hydraulic head is higher than the soil elevation are counted as "error cells". Then the percentage of error cells is compared between the five selected models. The one that exhibits the fewest error cells is selected as the best ANFIS model.

3.4. ANFIS sensitivity to input data

Once the best ANFIS model is selected, a sensitivity analysis is made on input data. First, ANFIS sensitivity to soil elevation is assessed. To do so, an error of $-3, -2, -1, 1, 2$ and 3 m is added to the soil elevation of each cell of the (50×50) -m grid. The selected ANFIS model is then used to assess the resulting hydraulic head distribution. Finally the resulting hydraulic head is compared to the reference one (Fig. 5) by calculating the difference between the two estimates at each cell center. The same method is used to assess ANFIS sensitivity to XY coordinates by propagating an error of $-10, -5, +5$, and $+10$ m.

Let consider X^e the perturbed variable

$$X^e = X + \varepsilon, \quad (8)$$

where ε is the perturbation in meters. Each coordinate y_i^e of the perturbed input data (Y^e) is preprocessed as follows,

$$y_i^e = \frac{x_i^e - \bar{X}}{\sigma_X}, \quad (9)$$

where x_i^e is the i th coordinate of X^e , $\bar{X}$ is the average of the X vector's coordinates, and σ_X is its standard deviation.

4. Results

4.1. ANFIS sensitivity to MF

First the optimal number of iterations needs to be determined for each ANFIS model (Table 2). Each ANFIS model behaves in a specific way and the optimal number of iterations ranges between

Table 2

Number of iterations for ANFIS model for a given number of MF per node.

Number of MF	MF_{gauss}	MF_{gbell}	MF_{pi}	MF_{tri}
2	2200	4000	1350	400
3	4000	900	300	400
4	900	500	700	500
5	250	500	300	300

Table 3

RMSE and R^2 for different numbers of MF per input node.

Type of MF	2		3		4		5	
	RMSE	R^2	RMSE	R^2	RMSE	R^2	RMSE	R^2
MF_{gauss}								
TR	0.22	1.00	0.00	1.00	0.00	1.00	0.00	1.00
VAL	4.23	0.94	3.19	0.97	3.47	0.96	2.63	0.98
TEST	3.47	0.97	3.83	0.96	2.15	0.99	3.76	0.96
MF_{gbell}								
TR	0.08	1.00	0.00	1.00	0.00	1.00	0.00	1.00
VAL	5.06	0.91	2.69	0.98	2.84	0.97	2.67	0.98
TEST	3.38	0.97	3.41	0.97	3.14	0.97	2.77	0.98
MF_{pi}								
TR	0.47	1.00	0.00	1.00	0.01	1.00	0.00	1.00
VAL	2.97	0.97	3.50	0.96	2.88	0.97	6.91	0.84
TEST	5.66	0.91	2.71	0.98	3.00	0.98	6.21	0.89
MF_{tri}								
TR	1.02	1.00	0.01	1.00	0.00	1.00	0.00	1.00
VAL	2.82	0.97	3.27	0.96	3.94	0.95	1.76	0.99
TEST	3.58	0.97	3.88	0.96	2.35	0.98	3.33	0.97

Notes. TR: Training; VAL: Validation; T: Test data subsets.

250 and 4000 (Table 2), leading to different performance for low-water-flow regime (Table 3). For all cases, the ANFIS model is very sensitive to the type of MF, and to the number of MF, with an RMSE calculated for the test subset ranging between 2.15 m for MF_{gauss}^4 and 6.21 m for MF_{pi}^5 . As previously observed (Kurtulus et al., 2010, 2011), the R^2 criteria are high (R^2 always higher than 0.9) and do not discriminate among models, except for MF_{pi}^5 , which has a validation R^2 of only 0.84 (Table 3).

Contrary to high-water-flow regime (Kurtulus et al., 2011), models with only two MF have poor performance, and even the

RMSE of the training subset is higher than 0, which is not the case for the other models with more than two MF. This means that the models with two MF are not well trained. It is interesting that even if models with more than two MF are well trained, the RMSE calculated for the validation subset fluctuates between 1.76 m for MF_{tri}^5 and 6.91 m for MF_{pi}^5 .

Table 4
Percentage of negative cells for a given difference between the elevation of the soil and the hydraulic head.

DEM-HH (m)	MF_{gauss}^4	MF_{gbell}^5	MF_{pi}^3	MF_{pi}^4	MF_{tri}^4
0	21.6	14.8	14.0	32.3	13.3
−1	16.3	9.9	10.8	29.0	9.7
−2	12.3	6.9	8.2	26.2	6.9
−3	9.0	5.2	6.3	22.8	4.8
−4	6.4	4.4	4.4	19.8	3.2
−5	4.7	3.9	2.8	17.0	1.9

Table 5
Statistics on analysis of sensitivity to soil elevation.

	−3 m	−2 m	−1 m	Ref	+1 m	+2 m	+3 m
Min [m]	93.1	93.8	94.5	95.2	95.9	96.5	97.2
Max [m]	189.6	190.5	191.7	192.5	193.4	194.3	195.2
Mean [m]	141.5	142.2	143.0	143.7	144.5	145.3	146.1
Std [m]	17.7	17.8	17.9	18.0	18.1	18.2	18.2

Notes. Min: Minimum; Max: Maximum; Std: Standard deviation. Ref: Reference simulation for MF_{tri}^4 .

Table 6
Statistics on analysis of sensitivity to Cartesian coordinates.

	−10m	−5m	Ref	+5m	+10m
Min [m]	95.1	95.1	95.2	95.2	95.2
Max [m]	192.5	192.5	192.5	192.6	192.6
Mean [m]	143.7	143.7	143.7	143.8	143.8
Std [m]	18.0	18.0	18.0	18.1	18.1

Notes. Min: Minimum; Max: Maximum; Std: Standard deviation. Ref: Reference simulation for MF_{tri}^4 .

The best performances are mainly obtained with four MF. Finally five models are selected— MF_{gauss}^4 , MF_{tri}^4 , MF_{pi}^3 , MF_{gbell}^5 , MF_{pi}^4 —with an RMSE ranging between 2.15 and 3 m and an R^2 over 0.98 for the test subset and over 0.95 for the validation one (Table 3).

Table 4 summarizes the percentage of error cells, which ranges between 13.3% and 32.3%. Except for MF_{gauss}^4 and MF_{pi}^4 , the number of error cells decreases to around 10% when an error of 1 m is tolerated (Table 4), which illustrates the sensitivity of the model to input data and especially the elevation of the soil. MF_{tri}^4 has the smallest number of error cells of 13.3%. The number of error cells decreases to less than 2% when an error of 5 m is tolerated (Table 4), which is also the smallest number of error cells among the five selected models.

Finally, MF_{tri}^4 is considered the best model, which is used to interpolate the hydraulic head distribution on the Avenelles watershed (Fig. 5). The interpolated hydraulic head distribution exhibits a realistic pattern, with isolines being perpendicular to the watershed border. This means that the underground watershed corresponds to the surface one, which is a reasonable assumption for this kind of agricultural watershed located on a plateau located between two incised valleys (Flipo et al., 2009). The pattern of groundwater drainage by the stream network is also well interpolated by the ANFIS model, with a flow direction from North to South and a higher drainage rate located in the northeastern part of the watershed. Only the Hill of Doue, which corresponds to Stampian sand locally overlying the Rupelian limestone (Fig. 1), perturbs the model, which poorly interpolates the hydraulic head distribution in this neighborhood, creating a groundwater pool that cannot exist. This problem was already pointed out by Kurtulus et al. (2010) for the interpolation of hydraulic head distribution during the high-water-flow regime. One way to overcome this issue could be to create an artificial soil elevation in this location, using ordinary kriging to smooth the hill.

4.2. ANFIS sensitivity to input data

Tables 5 and 6 indicate the results of the analysis of sensitivity to input data. It appears that the ANFIS model is much more sensitive to the elevation of the soil than to the Cartesian coordinates. This is mainly due to the preprocessing, which transforms each variable to a reduced and centered one. It is

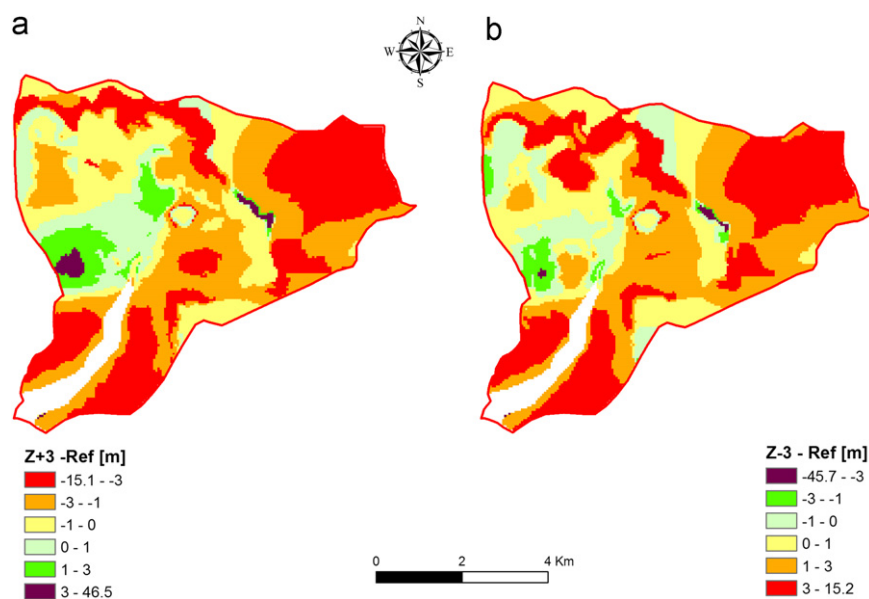


Fig. 6. Differences between interpolated hydraulic head distribution with a perturbed soil elevation and the reference hydraulic head distribution with MF_{tri}^4 : (a) soil elevation +3 m; (b) soil elevation −3 m.

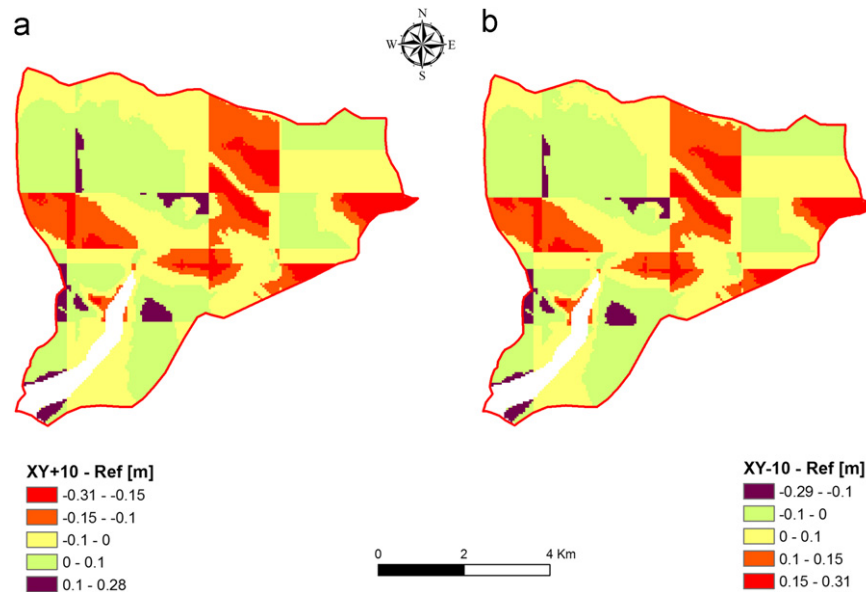


Fig. 7. Differences between interpolated hydraulic head distribution with perturbed Cartesian coordinates (XY) and the reference hydraulic head distribution with MF_{tr}^4 : (a) XY + 10 m; (b) XY - 10 m.

clear that a perturbation of a few meters leads to a smaller perturbation for the transformed variable of Cartesian coordinates (around 10^5 – 10^6 m) than for the perturbation of the elevation of the soil (around 10^2 m).

A perturbation of the soil elevation by a few meters leads to a hydraulic head distribution that is on the average different from the reference one (MF_{tr}^4) of a few meters. For instance, a perturbation of the soil elevation by +3 m leads to a hydraulic head distribution that is on the average 2.4 m higher than the reference one (Table 5). Negative and positive perturbations have a rather symmetrical effect on the estimated hydraulic head distribution. For instance, a decrease of the soil elevation by -3 m leads to an average decrease of the mean hydraulic head of 2.2 m, whereas an increase of +3 m leads to an average increase of the mean hydraulic head of 2.4 m (Table 5).

The sensitivity analysis reveals that the ANFIS model is not very sensitive to errors of a few meters on XY coordinates. Indeed, the absolute maximum difference is around 10 cm for an error on XY coordinates of 10 m (Table 6).

ANFIS response to two opposite perturbations is rather symmetrical for both Cartesian coordinates and soil elevation (Figs. 6 and 7). This means that the hydraulic head distribution estimated by ANFIS is rather symmetrical around the reference one (MF_{tr}^4) for perturbations of $+x$ m and $-x$ m, respectively. It is interesting that even if the estimated hydraulic head distribution is on the average in agreement with the amplitude of the perturbation (Tables 5 and 6), the local impact of a given perturbation can be either positive or negative. Indeed, Figs. 6 and 7 indicate that the local influence of a small perturbation is highly variable, ranging up to 30 cm for perturbations of the Cartesian coordinates and up to 46 m for perturbations of the soil elevation. ANFIS is hence very sensitive to the soil elevation and has stability issues with regard to this variable, because a perturbation of 3 m can lead to a difference between hydraulic head that is one order of magnitude higher than the perturbation itself. Thus a rather small error can modify the local hydraulic head significantly.

5. Conclusions

In this paper a method for selecting an ANFIS model for interpolating hydraulic head distribution at the watershed scale

is proposed. The selection of the best model also allows a sensitivity analysis of the model to the type and number of membership functions. This analysis reveals that the model is very sensitive to the type and number of MF. Thus it is necessary to perform such an analysis before using an ANFIS model or to include this analysis in the selection of the best ANFIS model.

Once selected, the best ANFIS model (MF_{tr}^4) was used to interpolate hydraulic head distribution at the watershed scale for the low-water-flow regime. The comparison of two studies of Kurtulus et al. (2010, 2011) indicates that adding the elevation of the soil to the Cartesian coordinates as input data of the ANFIS model significantly improves the performance of the model to interpolate hydraulic head distribution for the high-water-flow regime. Indeed, for the high-water-flow regime, the percentage of error cells is reduced from 24% with two inputs to 11% with three inputs. Albeit using soil elevation data significantly improves model performances, the ANFIS model is very sensitive to this data, what can lead to local stability issues for the estimated hydraulic head distribution, as indicated in Section 4.2. Further work should compare the hydraulic head distribution estimated by ANFIS with another interpolator, such as kriging with an external drift.

Acknowledgments

This work was funded by the ANR Carnot MINES “Neuro N'Eaudyssée”, the PIREN Seine research program, the FIRE FR3020 (CNRS/UPMS, Federation Ile de France de Recherche en Environnement), and TÜBITAK. It is also a contribution to the GIS Oracle that maintains the experimental basin of the Orgeval. We kindly thank the BRGM for providing the DEM of the top of the aquifer system. We also kindly thank G. Tallec, C. Fesneau, G. Vilain, J. Tournebize, J. Garnier and G. Billen for their help during the snapshot campaigns. Finally, the support and comments of Patrick Goblet were very useful to clarify the paper.

References

- Abedini, M., Nasser, M., Ansari, A., 2008. Cluster-based ordinary kriging of piezometric head in west Texas/New Mexico—testing of hypothesis. *Journal of Hydrology* 351 (3–4), 360–367.

- Abraham, R., Kneale, P., See, L. (Eds.), 2004. *Neural Networks for Hydrological Modelling*. A.A. Balkema Publishers.
- Ahmadi, S., Sedghamiz, A., 2008. Application and evaluation of kriging and cokriging methods on groundwater depth mapping. *Environmental Monitoring and Assessment* 138 (1), 357–368.
- Antcil, F., Filion, M., Tournebize, J., 2009. A neural network experiment on the simulation of daily nitrate–nitrogen and suspended sediment fluxes from a small agricultural catchment. *Ecological Modelling* 220, 879–887.
- Ayvaz, M.T., Karahan, H., Aral, M.M., 2007. Aquifer parameter and zone structure estimation using kernel-based fuzzy c-means clustering and genetic algorithm. *Journal of Hydrology* 343, 240–253.
- Bárdossy, A., 1996. The use of fuzzy rules for the description of elements of the hydrological cycle. *Ecological Modelling* 85, 59–65.
- Bárdossy, A., Haberlandt, U., Krysanova, V., 2003. Automatic fuzzy-rule assessment and its application to the modelling of nitrogen leaching for large regions. *Soft Computing* 7, 370–385.
- Beven, K., 1989. Changing ideas in hydrology. The case of physically-based model. *Journal of Hydrology* 105, 157–172.
- Billen, G., Garnier, J., Mouchel, J.-M., Silvestre, M., 2007. The Seine system: introduction to a multidisciplinary approach of the functioning of a regional river system. *Science of the Total Environment* 375, 1–12.
- Boezio, M., Costa, J., Koppe, J., 2006. Accounting for extensive secondary information to improve watertable mapping. *Natural Resources Research* 15 (1), 33–48.
- Brochu, Y., Marcotte, D., 2003. A simple approach to account for radial flow and boundary conditions when kriging hydraulic head fields for confined aquifers. *Mathematical Geology* 35 (2), 111–139.
- Buchanan, S., Triantafyllis, J., 2009. Mapping water table depth using geophysical and environmental variables. *Ground Water* 47 (1), 80–96.
- Chang, F.-J., Chang, Y.-T., 2006. Adaptive neuro-fuzzy inference system for prediction of water level in reservoir. *Advances in Water Research* 29, 1–10.
- Chang, Y., Chang, L.-C., Chang, F.-J., 2005. Intelligent control for modeling of real-time reservoir operation. Part II. Artificial neural network with operating rule curves. *Hydrological Processes* 19, 1431–1444.
- Chen, S.-H., Lin, Y.-H., Chang, L.-C., Chang, F.-J., 2006. The strategy of building a flood forecast model by neuro-fuzzy network. *Hydrological Processes* 20, 1525–1540.
- Chidthong, Y., Tanaka, H., Supharatid, S., 2009. Developing a hybrid multi-model for peak flood forecasting. *Hydrological Processes* 23, 1725–1738.
- Chu, H.-J., Chang, L.-C., 2009. Application of optimal control and fuzzy theory for dynamic groundwater remediation design. *Water Resource Management* 23, 647–660.
- Demuth, H., Beale, M., 2003. *Neural Networks Toolbox User Guide*. Technical Report, Mathworks Inc.
- Desbarats, A.J., Logan, C.E., Hinton, M.J., Sharpe, D.R., 2002. On the kriging of water table elevations using collateral information from a digital elevation model. *Journal of Hydrology* 255 (1–4), 25–38.
- Ebel, B., Loague, K., 2006. Physics-based hydrologic-response simulation: seeing through the fog of equifinality. *Hydrological Processes* 20, 2887–2900.
- El-Shafie, A., Taha, M.R., Noureldin, A., 2007. A neuro-fuzzy model for inflow forecasting of the Nile River at Aswan High Dam. *Water Resource Management* 21, 533–556.
- Firat, M., 2008. Comparison of artificial intelligence techniques for river flow forecasting. *Hydrological Earth System Science* 12, 123–138.
- Firat, M., Gungor, M., 2007. River flow estimation using adaptive neuro fuzzy inference system. *Mathematics and Computers in Simulation* 75, 87–96.
- Firat, M., Gungor, M., 2008. Hydrological time-series modelling using an adaptive neuro-fuzzy inference system. *Hydrological Processes* 22, 2122–2132.
- Firat, M., Turan, M.E., Yurdusev, M.A., 2009. Comparative analysis of fuzzy inference systems for water consumption time series prediction. *Journal of Hydrology* 374, 235–241.
- Flipo, N., Even, S., Poulin, M., Théry, S., Ledoux, E., 2007a. Modelling nitrate fluxes at the catchment scale using the integrated tool CaWQS. *Science of the Total Environment* 375, 69–79.
- Flipo, N., Jeannée, N., Poulin, M., Even, S., Ledoux, E., 2007b. Assessment of nitrate pollution in the Grand Morin aquifers (France): Combined use of geostatistics and physically-based modeling. *Environmental Pollution* 146 (1), 241–256.
- Flipo, N., Rabouille, C., Poulin, M., Even, S., Tusseau-Vuillemin, M., Lalande, M., 2007c. Primary production in headwater streams of the Seine basin: The Grand Morin case study. *Science of the Total Environment* 375, 98–109.
- Flipo, N., Rejiba, F., Kurtulus, B., Tournebize, J., Tallec, G., Vilain, G., Garnier, J., Ansart, P., Lotteau, M., 2009. Caractérisation des fonctionnements hydrologique et hydrogéologique du bassin de l'Orgeval. Technical Report, PIREN Seine.
- Garcia, L.A., Shigidib, A., 2006. Using neural networks for parameter estimation in ground water. *Journal of Hydrology* 318, 215–231.
- Heuvelmans, G., Muys, B., Feyen, J., 2006. Regionalisation of the parameters of a hydrological model: Comparison of linear regression models with artificial neural nets. *Journal of Hydrology* 319 (1–4), 245–265.
- Hoeksema, R., Clapp, R., Thomas, A., Hunley, A., Farrow, N., Dearstone, K., 1989. Cokriging model for estimation of water table estimation. *Water Resources Research* 25 (3), 429–438.
- Hong, Y.-S.T., White, P.A., 2009. Hydrological modeling using a dynamic neuro-fuzzy system with on-line and local learning algorithm. *Advances in Water Research* 32, 110–119.
- Jang, J., 1993. ANFIS adaptive-network-based fuzzy inference systems. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics* 23 (3), 665–685.
- Jang, J., 1995. Neuro-fuzzy modeling and control. *Proceedings of the IEEE* 83 (3), 378–406.
- Jang, J., 1996. Input selection for ANFIS learning. *IEEE International Conference on Fuzzy Systems* 2, 1493–1499.
- Johannet, A., Ayral, P., Vayssade, B., 2007. Modelling non measurable processes by neural networks: Forecasting underground flow case study of the Cèze basin (Gard—France). In: *Advances and Innovation in Systems, Computing Sciences and Software Engineering*, pp. 53–58.
- Karahan, H., Ayvaz, M.T., 2008. Simultaneous parameter identification of a heterogeneous aquifer system using artificial neural networks. *Hydrogeology Journal* 16, 817–827.
- Kholghi, M., Hosseini, S.M., 2009. Comparison of groundwater level estimation using neuro-fuzzy and ordinary kriging. *Environmental Model Assessment* 14 (6), 729–737.
- Kuo, Y.-M., Liu, C.-W., Lin, K.-H., 2004. Evaluation of the ability of an artificial neural network model to assess the variation of groundwater quality in an area of blackfoot disease in Taiwan. *Water Research* 38 (1), 148–158.
- Kurtulus, B., Flipo, N., Goblet, P., 2010. Sensitivity analysis on an adaptive neuro fuzzy inference system (ANFIS) for hydraulic head interpolation: Orgeval experimental site/france. In: *Carrera, J. (Ed.), XVIII International Conference on Water Resources CMWR 2010*.
- Kurtulus, B., Flipo, N., Goblet, P., Vilain, G., Tournebize, J., Tallec, G., 2011. Hydraulic head interpolation in an aquifer unit using ANFIS and Ordinary Kriging. *Studies in Computational Intelligence* 343, 265–276, doi:10.1007/978-3-642-20206-3_18.
- Kurtulus, B., Razack, M., 2007. Evaluation of the ability of an artificial neural network model to simulate the input–output responses of a large karstic aquifer. The La Rochefoucauld (Charente France). *Hydrogeology Journal* 15 (2), 241–254.
- Kurtulus, B., Razack, M., 2010. Modeling daily discharge responses of a large karstic aquifer using soft computing methods: Artificial neural network and neuro-fuzzy. *Journal of Hydrology* 381, 101–111.
- Ledoux, E., Gomez, E., Monget, J., Viavattene, C., Viennot, P., Ducharme, A., Benoit, M., Mignolet, C., Schott, C., Mary, B., 2007. Agriculture and groundwater nitrate contamination in the Seine basin. The STICS-MODCOU modelling chain. *Science of the Total Environment* 375, 33–47.
- Lin, G.-F., Chen, L.-H., 2004. A spatial interpolation method based on radial basis function networks incorporating a semivariogram model. *Journal of Hydrology* 288 (3–4), 288–298.
- Luchetta, A., Manetti, S., 2003. A real time hydrological forecasting system using a fuzzy clustering approach. *Computers & Geosciences* 29, 1111–1117.
- Lyon, S., Seibert, J., Lembo, A., Walter, M., Steenhuis, T., 2006. Geostatistical investigation into the temporal evolution of spatial structure in a shallow water table. *Hydrology and Earth Systems Science* 10 (1), 113–125.
- Marcé, R., Comerma, M., Garcia, J., Armengo, J., 2004. A neuro-fuzzy modeling tool to estimate fluvial nutrient loads in watersheds under time-varying human impact. *Limnology and Oceanography: Methods* 2, 342–355.
- Minns, A., Hall, M., 2004. *Rainfall–Runoff Modelling*. AA Balkema Publishers, pp. 157–176 (Chapter 9).
- Morshed, J., Kaluarachchi, J.J., 1998. Application of artificial neural network and genetic algorithm in flow and transport simulations. *Advances in Water Resources* 22 (2), 145–158.
- Nayak, P., Sudheer, K., Ragan, D., Ramasastri, K., 2004. A neuro-fuzzy computing technique for modeling hydrological time series. *Journal of Hydrology* 291, 52–66.
- Pai, T., Wan, T., Hsu, S., Chang, T., Tsai, Y., Lin, C., Hu, H., Yu, L., 2009. Using fuzzy inference system to improve neural network for predicting hospital wastewater treatment plant effluent. *Computers and Chemical Engineering* 33, 1272–1278.
- Pardo-Igúzquiza, E., Chica-Olmo, M., 2007. KRIGRADI: A cokriging program for estimating the gradient of spatial variables from sparse data. *Computers & Geosciences* 33, 497–512.
- Pardo-Igúzquiza, E., Chica-Olmo, M., Garcia-Soldado, M., Luque-Espinar, J.A., 2009. Using semivariogram parameter uncertainty in hydrogeological applications. *Ground Water* 47 (1), 25–34.
- Polus, E., Flipo, N., de Fouquet, C., Poulin, M., 2011. Geostatistics for assessing the efficiency of distributed physically-based water quality model. Application to nitrates in the Seine river. *Hydrological Processes* 25 (2), 217–233.
- Pratihari, D., 2008. *Soft Computing*. Alpha Science International Ltd.
- Renard, F., Jeanne, N., 2008. Estimating transmissivity fields and their influence on flow and transport: The case of Champagne mounts. *Water Resources Research* 44, 1–12.
- Rivest, M., Marcotte, D., Pasquier, P., 2008. Hydraulic head field estimation using kriging with an external drift: A way to consider conceptual model information. *Journal of Hydrology* 361 (3–4), 349–361.
- Sahoo, G., Ray, C., Wade, H., 2005. Pesticide prediction in ground water in North Carolina domestic wells using artificial neural networks. *Ecological Modelling* 183, 29–46.
- Samani, N., Gohari-Moghadam, M., Safavi, A., 2007. A simple neural network model for the determination of aquifer parameters. *Journal of Hydrology* 340, 1–11.
- Sun, Y., Kang, S., Li, F., Zhang, L., 2009. Comparison of interpolation methods for depth to groundwater and its temporal and spatial variations in the Minqin Oasis of northwest China. *Environmental Modelling & Software* 24 (10), 1163–1170.
- Takagi, T., Sugeno, M., 1985. Fuzzy identification of systems and its applications to modeling and control. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics* 15 (1), 116–132.

- Theodossiou, N., Latinopoulos, P., 2006. Evaluation and optimisation of groundwater observation networks using the kriging methodology. *Environmental Modelling & Software* 21 (7), 991–1000.
- Tutmez, B., Hatipoglu, Z., Kaymak, U., 2006. Modelling electrical conductivity of groundwater using an adaptive neuro-fuzzy inference system. *Computers & Geosciences* 32 (4), 421–433.
- Wang, W.-C., Chau, K.-W., Cheng, C.-T., Qiu, L., 2009. A comparison of performance of several artificial intelligence methods for forecasting monthly discharge time series. *Journal of Hydrology* 374, 294–306.
- Yan, S., Minsker, B., 2006. Optimal groundwater remediation design using an adaptive neural network genetic algorithm. *Water Resources Research* 42 (5), W05407.
- Yurdusev, M.A., Firat, M., 2009. Adaptive neuro fuzzy inference system approach for municipal water consumption modeling: An application to Izmir, Turkey. *Journal of Hydrology* 365, 225–234.
- Zadeh, L., 1965. Fuzzy sets. *Information and Control* 8, 338–353.
- Zanchettin, C., Minku, F., Ludernir, T., 2005. Design of experiments in neuro-fuzzy systems. In: *Proceedings of the Fifth International Conference on Hybrid Intelligent Systems (HIS05)*, IEEE.

- D.3** [Saleh et al. \(2011\)](#) Modeling the impact of in-stream water level fluctuations on stream-aquifer interactions at the regional scale. *Journal of Hydrology* 400(3-4), 490–500.



Modeling the impact of in-stream water level fluctuations on stream-aquifer interactions at the regional scale

Firas Saleh^{a,b}, Nicolas Flipo^{b,*}, Florence Habets^{a,b}, Agnès Ducharne^a, Ludovic Oudin^a, Pascal Viennot^b, Emmanuel Ledoux^b

^a CNRS/UPMC, UMR 7619 Sisyphe, 4 place Jussieu, 75252 Paris, France

^b MINES ParisTech, Geosciences Department, 77305 Fontainebleau, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 20 July 2010

Received in revised form 22 January 2011

Accepted 3 February 2011

Available online 24 February 2011

This manuscript was handled by L. Charlet, Editor-in-Chief, with the assistance of Chong-yu Xu, Associate Editor

Keywords:

Stream-aquifer interactions

Hydrology

Hydrogeology

Upscaling

Regional scale

Eau-Dyssée model

SUMMARY

The main objective of this study is to provide a realistic simulation of river stage in regional river networks in order to improve stream-aquifer interactions and better assess stream discharge and hydraulic head in aquifer units.

The study focuses on the Oise basin (a 17,000 km² sub-basin of the Seine River basin, in Northern France). An upscaling method is proposed to benefit from high resolution hydraulic modeling at local scale to improve the simulation of river stages at regional scale. The methodology is based on simulation of the main rivers with a 1D Saint-Venant approach, from which functional stage-discharge relationships, are derived and projected onto each grid-cell of the regional model.

At regional scale, the rating curves are used as boundary conditions and allow to calculate river stage, which is then used to calculate the exchanges between aquifer units and river. The approach is efficient to better simulate water pathways and stream-aquifer interactions at regional scale with low computing cost.

The model was used to quantify stream to aquifer exchanges, that are in average 39 mm yr⁻¹ for aquifer to stream fluxes and 2 mm yr⁻¹ for stream to aquifer fluxes, mainly due to storage in aquifer units during storm events.

© 2011 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Surface water and groundwater are connected components of the hydrosystem (Winter, 1998). They interact in a variety of physiographic and climatic landscapes. Contamination of one of them commonly affects the other one. Therefore, an understanding of the basic principles of interactions between surface water and groundwater is important for effective management of water resources.

The increasing concerns in the past few decades over in-stream flows, riparian conditions, Total Maximum Daily Load (TMDL) limits and nitrate contaminations have motivated researchers to expand the stream aquifer interaction scope to include studies of headwater streams, wetlands, nutrient discharge, climate change, lakes and estuaries (Winter, 1995; Smith and Turner, 2001; Smith and Townley, 2002; Anderson, 2003; Hunt et al., 2008; Walker et al., 2008; Henderson et al., 2009).

* Corresponding author. Address: MINES ParisTech, Geosciences Department, 35 rue Saint-Honoré, 77305 Fontainebleau, France. Tel.: +33 (0)164694752.

E-mail address: Nicolas.Flipo@mines-paristech.fr (N. Flipo).

The interaction between surface and groundwater is a complex process and depends on many physical factors that are directly related to topography, geology, and climate (Sophocleous, 2002; Winter, 1998, 2002). A number of experimental methods exist to estimate the exchange between streamwater and groundwater. For instance, some methods are based on water mass balance assessment between two in-stream gauging stations (Lange, 2005). Other ones use observed hydraulic head fluctuations within piezometers close by the stream to assess increase or decrease of the aquifer water storage, from which the infiltration/exfiltration rate of water is derived (Blasch et al., 2004; Sanford, 2002). These methods are widely used in flood-water infiltration studies but they require the availability of consistent data along the river which is not always the case at the regional scale.

Due to the level of complexity, many modelers have considered limited or no interactions between surface and subsurface flows. Therefore, even though specific models provide good results for simulating the water flows, deviations occur when the interactions between these domains become important (Gunduz and Aral, 2005).

The recognition of those interactions motivated researchers to focus on coupled models. Meyboom (1961), Cooper and Rorabaugh

An original methodology is hereafter proposed to couple surface and subsurface flow. It is based on an upscaling approach, which uses resolution hydraulic modeling outputs to improve the simulation of fluctuating river stage in a regional scale hydro(geo)logical model.

2. Models description

2.1. The hydraulic model HEC-RAS

2.2. The Eau-Dyssée platform for hydrosystem modeling

The modeling platform Eau-Dyssée couples existing specialized models to address water resources and quality in regional scale river basins. The hydrogeological part of Eau-Dyssée is based on the MODCOU model (Ledoux et al., 1984, 1989) with improved interactions. The core of the model is composed of four spatially distributed modules, corresponding to four components of the terrestrial water cycle: the surface component, the unsaturated component, the saturated zone or aquifer component and the river network component (Fig. 1).

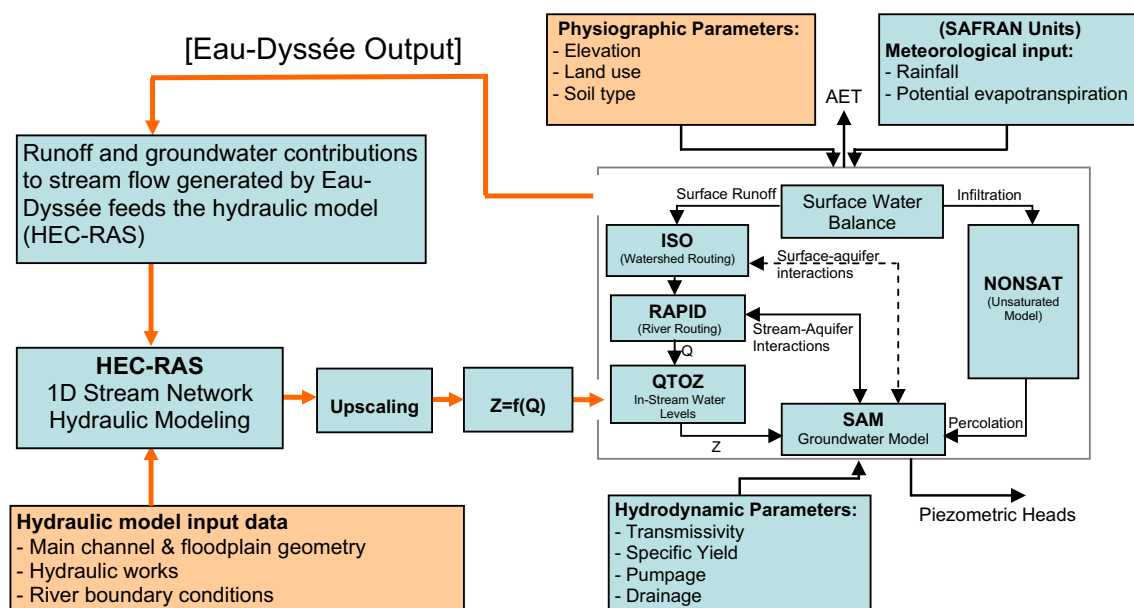


Fig. 1. Modeling framework.

2.2.1. Surface component

The domain is divided into production zones to which a 7-parameter model called production function is associated (Gomez et al., 2003; Saleh, 2010). It computes the hydrological mass balance at a daily time step for each cell of the surface mesh. The input data consist in a meteorological database (precipitation and potential evapotranspiration) with a daily time step and a spatial resolution of $8 \text{ km} \times 8 \text{ km}$. Data are derived from Météo-France SAFRAN database (Quintana-Seguí et al., 2008). The outputs are actual evapotranspiration (AET), soil water stock, the water flux that infiltrates to the aquifer system and the one corresponding to surface runoff. The latter is routed to the river network by the ISO module (Fig. 1). Each drainage area is divided into a number of isochronal zones equal to the number of time steps necessary for flow to reach the nearest river cell. The transfer times depend on topography and concentration time (Ledoux et al., 1984; Saleh, 2010).

2.2.2. Unsaturated zone component

The infiltrated water partitioned by the production function is transferred vertically to the groundwater table by the unsaturated-zone model NONSAT (Ledoux, 1980; Gomez et al., 2003; Flipo et al., 2005). This conceptual model consists in a succession of reservoirs. The number of reservoirs is related to the distance between soil horizons and the saturated zone. This distance is initially calculated based on the hydraulic head distribution resulting from a steady state simulation using the mean annual infiltration as boundary conditions.

2.2.3. The saturated zone component SAM (Simulation des Aquifères Multicouches)

The SAM model (Ledoux et al., 1984, 1989) is a regional spatially distributed model that computes the temporal distribution of the piezometric heads of multilayer aquifer units, using the diffusivity equation (de Marsily, 1986). In each aquifer, flows are bidimensional whereas they are vertically monodimensional in the aquitard between two horizontal layers. The multilayer model simulates confined and unconfined aquifer units. The variation through time of the head is modeled by nonlinear Boussinesq. It also computes exchange between aquifer units and rivers. The former version of SAM (Ledoux et al., 1984, 1989) has successfully predicted surface and groundwater flow in many basins of varying scales and hydrogeological settings: the Haute-Lys and Caramy basins (Ledoux, 1980); the HAPEX-MOBILHY study (Boukema, 1987); the Fecht river basin (Ambroise et al., 1995); the Rhône basin (Habets et al., 1999), the Seine basin (Gomez et al., 2003) and

the Somme basin (Habets et al., 2010). It is currently being implemented in the Rhine River (Thierion et al., 2010) and the Loire basin (Monteil et al., 2010).

2.2.4. The river routing component RAPID

The in-stream water routing within the platform Eau-Dyssée is conducted by a parallel computing-based river routing model called RAPID (David et al., 2010), Routing Application for Parallel Computation of Discharge, which is based on the Muskingum routing scheme:

$$I - O = \Delta S / \Delta t \quad (1)$$

where I and O are the upstream and downstream discharge respectively [$\text{L}^3 \text{T}^{-1}$], and ΔS [L^3] is the change in storage within the reach during a Δt time increment [T]. The storage S is related to both in-flow and outflow:

$$S = k(\alpha I + (1 - \alpha)O) \quad (2)$$

where k is the transfer time [T] between two adjacent river cells, and α is a weighting parameter [dimensionless]. Further information on how these parameters are determined can be found in Section 3.

RAPID is designed to be coupled with land surface models and groundwater models, and allows for flow and volume calculations in each cell of a river network.

2.2.5. Stream-aquifer interactions

Stream-aquifer interactions are calculated in each river grid cell from the difference between hydraulic heads in the river cell and the underlying aquifer cell. Depending on the sign of this difference, surface water either infiltrates towards aquifer units, or groundwater exfiltrates towards surface water.

River cells have a typical length of 1 km and are thus usually greater than the dimensions of the stream. Therefore, the stream-aquifer interactions are simplified and controlled by a coefficient called river conductance that relates stream-aquifer flow to the difference between the in-stream water level and the groundwater head:

$$q_{\text{aquifer}} = K_{\text{riv}} \cdot (h_r - h_g) \quad (3a)$$

where q_{aquifer} is the flow between stream and aquifer [$\text{L}^3 \text{T}^{-1}$], h_r is the in-stream water stage [L], h_g is the piezometric head in the aquifer unit [L] and K_{riv} is the hydraulic conductance of the stream-aquifer interconnection for a unit length of reach [$\text{L}^2 \text{T}^{-1}$]. Sensitivity analysis on this parameter can be found in Rushton (2007).

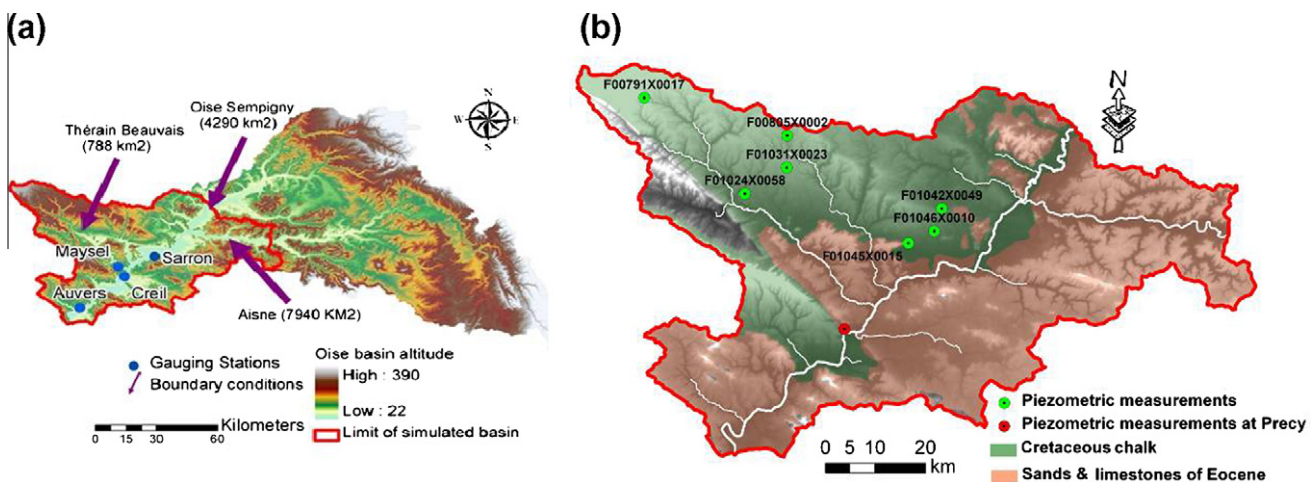


Fig. 2. (a) Oise River basin Hydrological boundary conditions and gauging stations; (b) Hydrogeological formations of the Oise basin and measured piezometric heads.

Within the SAM hydrological model, the magnitude of river infiltration towards aquifer units is controlled by a maximal value called Q_{max} [$L^3 T^{-1}$]. If Q_{max} is equal to zero, infiltration from stream to aquifer is not authorized even if the in-stream water level is higher than the water table level. The Q_{max} can be estimated either from field measurements based on local mass balance or through available literature on river's bed permeability (Lange, 2005).

2.3. Strategy to account for rivers stage fluctuations

Within the Eau-Dyssée framework, a strategy is proposed to benefit from the results of the high resolution 1D channel flow model HEC-RAS (Fig. 1). Runoff and groundwater contribution to stream flow are first simulated by Eau-Dyssée at the regional scale considering a fixed water level in each river cell. The hydraulic model HEC-RAS is fed by the previous inputs as lateral inflows, and by observed discharges at the upstream limits of the simulated river network (Fig. 1). After calibration and validation against both river discharges and stages at control stations, unsteady flow simulations are used to derive functional relationships between river stages and discharges (rating curves) at each cross section of the river network.

The derived rating curves are then upscaled onto each river cell of the regional model's mesh. The river grid-cells rating curves are input data of the QtoZ module, which provides a water level to the groundwater model SAM as function of the discharge routed by RAPID. Finally SAM uses water levels to simulate and quantify the exchange between the stream grid-cells and the aquifer grid-cells.

2.3.1. Upscaling from local hydraulic modeling to regional hydrological modeling

Once the 1D hydraulic model is calibrated, the derived rating curves from the local hydraulic model are upscaled toward the river grid-cells ($1 \text{ km} \times 1 \text{ km}$ in the application described below) of the regional hydrological model. The cross-sections of the high resolution hydraulic model are linearly projected along the river cells, by calculating a length equivalency factor between the high resolution river reach and the river grid-cell lengths. Then, an equivalent rating curve at the center of each river grid-cell is calculated by inverse distance weight averaging with respect to the river cell center:

$$h_r = \frac{\sum_{i=1}^n \left(\frac{z_i}{d_i} \right)}{\sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{d_i} \right)} \quad (4)$$

where h_r is the interpolated water level value in the center of the regional river grid-cell, z_i is the water level at each cross section

of the hydraulic model within the river cell, and d_i is the distance between these cross-sections and the center of the river cell (Fig. 3). The algorithm estimates the water level value (h_r) at the center of the river grid-cell as function of the water level values of the nearest cross sections contained in a regional river cell (Fig. 3). The equation assumes that estimated water levels are more similar to nearby elevations than to distant ones. Hence, the more distant a cross section is from the center of a river grid-cell, the less it influences the estimation of the water level in the center of the river grid-cell.

2.3.2. The QtoZ water level fluctuation module

The QtoZ module calculates the water level at a given river grid-cell as a function of the discharge routed by RAPID. The module has two options for calculating water level in each river grid-cell: (a) fixed water level, (b) water level estimated from a rating curve.

Within the platform Eau-Dyssée, the QtoZ module is coupled with the hydrological routing model RAPID and the groundwater model SAM. At each time step of the simulation, QtoZ receives discharge values from RAPID for each river grid-cell and calculates a water level which is sent to the groundwater model (SAM) in order to simulate stream-aquifer interactions.

3. Model implementation

The approach was tested in the Oise River basin, described below, over a period of 5 years (1990–1995). This evaluation comprised several steps: (a) running Eau-Dyssée without river stage fluctuations, (b) calibrating HEC-RAS to obtain rating curves along the high resolution river network, (c) upscaling these rating curves to the river cells of RAPID in the Eau-Dyssée platform, (d) running Eau-Dyssée with river stage fluctuations enabled, (e) assessing the local and regional impact of in-stream water level fluctuations on the hydrogeological system.

3.1. Study area: the Oise River

The Oise River (France) is the largest tributary of the Seine River ($65,000 \text{ km}^2$), France. Its total length is 340 km for a catchment area of $17,000 \text{ km}^2$ (Fig. 2a). Its springs are located in the Belgian province of Hainaut at an altitude of 323 m above sea level. It crosses the border with France approximately 20 km downstream from its springs. It joins the Seine River at Conflans-Sainte-Honorine, 75 km downstream from Paris along the Seine River. The average discharge at the Sarron hydrometric station ($14,200 \text{ km}^2$) is $112 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. In terms of hydrogeology, the Oise river network is connected with two main geological formations: Eocene sands and limestones, and Cretaceous chalk (Fig. 2b).

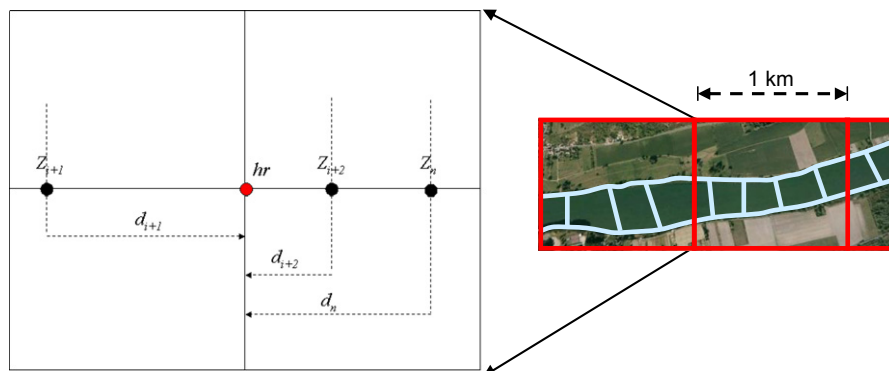


Fig. 3. Example of water level calculated at the center of the river grid-cell using the inverse distance weighted method.

The simulated part of the Oise River (Fig. 2a) covers 131 km downstream from Sempigny until the confluence with the Seine River at Conflans-Sainte-Honorine. It also includes part of the Oise's major tributaries, namely the Aisne downstream from Herant and the Thérain downstream from Beauvais (Fig. 2a). The total length of the simulated river network is 188 km, covering an area of 4000 km² (Fig. 2a).

3.2. Eau-Dyssée model simulations

The model is composed of 1868 surface cells, 202 river cells, 905 Eocene aquifer cells and 1053 Chalk aquifer cells. The main period of simulation is from 1/August/1990 to 31/July/1995.

3.2.1. Hydrogeological model initialization strategy

The hydrogeological module SAM needs proper initialization which aims at reaching steady state for the piezometric head distribution before running the model. Such steady state is obtained by spinning up the model. Generally, the spin-up is done either by running the model for a long period or by looping the model runs within a given period of time until the model converges towards a steady state (Rodell et al., 2005).

In this study, the spin-up period (1 August 1985 through 31 July 1986) is followed by a warm-up period (1 August 1986 through 31 July 1990) of the whole hydrogeological model Eau-Dyssée to initialize the water content of the unsaturated zone component before running the model for the period of interest (1 August 1990 through 31 July 1995).

3.2.2. Hydrodynamic characteristics of the hydro(geo)logical model

The hydrodynamic parameters of this study are the same as the ones previously used by Gomez et al. (2003). They are summarized in Table 1.

Regarding river routing, the k parameter of RAPID (Eq. (2)) was determined using a relative transfer time that is computed for each river cell based on topography and concentration time (Ledoux et al., 1984). Multiplied by a global concentration time of the basin (17 days), it provides the time needed to reach the outlet of the basin starting from a given river cell. Subtracting the transfer times of two neighboring cells gives the time needed to flow from the upstream cell to the downstream one, which is the k parameter of the Muskingum model (Monteil et al., 2010). Based on this technique, the distribution of k for the Oise basin varies from 500 to 5000 s for a spatial discretization of 1 km, the average k is 2443 s (equivalent to an average river velocity of 0.4 m s⁻¹) which is consistent for such river network.

The maximum authorized river to aquifer infiltration rate (Q_{max}) is calculated via a sensitivity analysis for which Q_{max} varies from

0 l s⁻¹ to 500 l s⁻¹ to determine the local and regional impact of this parameter on the overall system. The sensitivity analysis detailed in Section 4.2 shows that Eau-Dyssée simulations with variable river stages compares best to observations for $Q_{max} = 100$ l s⁻¹.

3.3. Statistical criteria used to assess models performance

Performance of the models is statistically evaluated using the criteria of standard deviation (Eq. (5)), correlation coefficient (Eq. (6)), Bias (Eq. (7)), RMSE (Eq. (8)) and Nash and Sutcliffe (1970) (Eq. (9)). These statistical criteria are used to globally characterize the quality of the simulations.

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X(t_i) - \bar{X})^2} \quad (5)$$

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^N (X_{obs}(t_i) - \bar{X}_{obs})(X_{sim}(t_i) - \bar{X}_{sim})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (X_{obs}(t_i) - \bar{X}_{obs})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N (X_{sim}(t_i) - \bar{X}_{sim})^2}} \quad (6)$$

$$BIAS = 100 \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (X_{sim}(t_i) - X_{obs}(t_i))}{\bar{X}_{obs}} \quad (7)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (X_{sim}(t_i) - X_{obs}(t_i))^2} \quad (8)$$

$$Nash = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (X_{sim}(t_i) - X_{obs}(t_i))^2}{\sum_{i=1}^N (X_{obs}(t_i) - \bar{X}_{obs})^2} \quad (9)$$

where N is the number of compared values, $X_{sim}(t_i)$ is the simulated value, $X_{obs}(t_i)$ is the observed value and $\bar{X}$ is the average of X time series.

4. Results

4.1. HEC-RAS model calibration

The Manning's roughness coefficient (n) [T L^{-1/3}], represents the energy loss due to the water friction with the bed surface's roughness. An increase of Manning's roughness coefficient in the main channel has the following impacts on the hydraulic response: (a) local increase in water stage (b) decrease of discharge peak as the flood wave moves downstream, (c) increase of travel time. The calibration was performed by a trial-error approach, aiming at maximizing the fit between simulated discharge and water levels against observations at four gauging stations (Sarron, Maysel, Creil and Auvers sur Oise, located in Fig. 2a) based on several statistical criteria (Table 2). Different roughness coefficients for different river reaches were used to calibrate the hydraulic model. Optimal values of Manning's roughness coefficients vary between 0.026 for the main reaches to 0.032 for the Oise tributaries which is consistent with standard values for such rivers (Chow, 1959). The roughness coefficient for the floodplain was fixed at 0.04 and had minor influence on the model performance. Results of the calibration are shown at Sarron for discharge and water level (Fig 4a and b).

Upon calibrating the hydraulic model, we tested the importance of feeding the hydraulic model with runoff and groundwater contributions calculated by Eau-Dyssée for discharges and river stages (Fig. 5). The resulting simulated discharge by the hydraulic model HEC-RAS is lower than the one estimated with regional inflows (groundwater and surface inputs from the basin). For instance at Auvers sur Oise, the underestimation is in average of 19% (Fig. 5).

Table 1
Hydrodynamic characteristics of the Seine hydrogeological model.

Hydrodynamic parameter	Parameter value
Eocene layer transmissivity (L ² T ⁻¹)	[7 × 10 ⁻⁴ ; 5.8 × 10 ⁻²] × m ² s ⁻¹
Eocene layer storage coefficient (dimensionless)	[9.9 × 10 ⁻⁵ –10 ⁻¹]
Chalk layer transmissivity (L ² T ⁻¹)	[5.8 × 10 ⁻³ – 6.5 × 10 ⁻²] × m ² s ⁻¹
Chalk layer vertical transmissivity (L ² T ⁻¹)	[1.5 × 10 ⁻¹² – 1.2 × 10 ⁻⁹] × m ² s ⁻¹
Chalk layer storage coefficient	[9.9 × 10 ⁻⁵ – 7.8 × 10 ⁻²]
Storage coefficient for both Eocene and Chalk aquifer cells underlying river cells (dimensionless)	0.15
River conductance (L ² T ⁻¹)	0.1 m ² s ⁻¹
Global concentration time of the basin (T)	17 days
Regional routing model time of transfer (T)	[500–5000] s

Table 2

Summary of HEC-RAS performances at the four available hydrometric stations. The statistical criteria are computed at the daily time step. RMSE: root mean square error, ρ : correlation coefficient, σ : standard deviation.

Station	Period	Discharge					Water level				
		Nash	Bias (%)	RMSE ($\text{m}^3 \text{s}^{-1}$)	σ_{obs}	σ_{sim}	RMSE (m)	Bias (%)	ρ	σ_{obs}	σ_{sim}
Sarron	1990–1995	0.97	−4.0	12	99.7	103.7	0.17	−0.26	0.96	0.6	0.54
Maysel	1990–1995	0.91	0.15	1.35	4.4	4.3	NA	NA	NA	NA	NA
Auvers	1990–1991	0.98	−4.0	13.4	105	107	NA	NA	NA	NA	NA
Creil	1990–1991	NA	NA	NA	NA	NA	0.09	0.07	0.94	0.24	0.25

NA: No available observations to compare with.

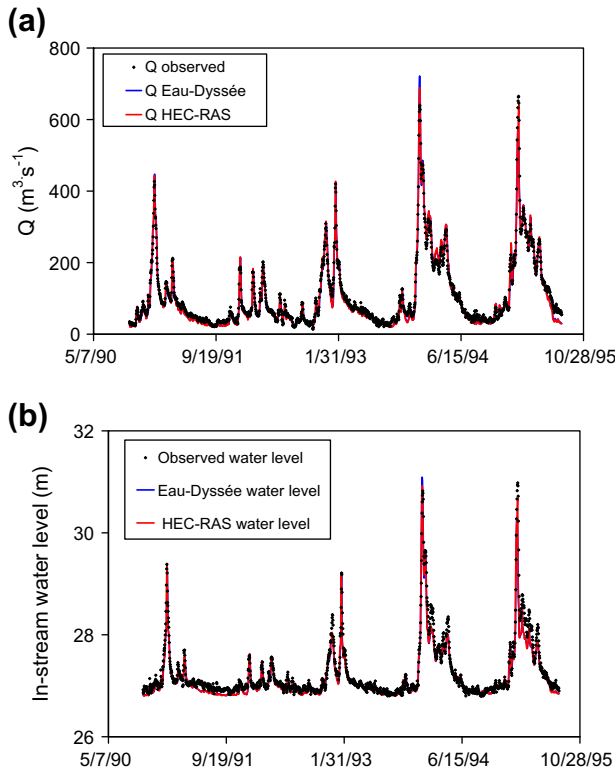


Fig. 4. Comparison of observations and simulations at the Sarron hydrometric station over 5 years: (a) river discharge, (b) river stage. Simulations from the high resolution hydraulic model HEC-RAS and the regional hydrogeological Eau-Dyssée with enabled river stage fluctuations are compared.

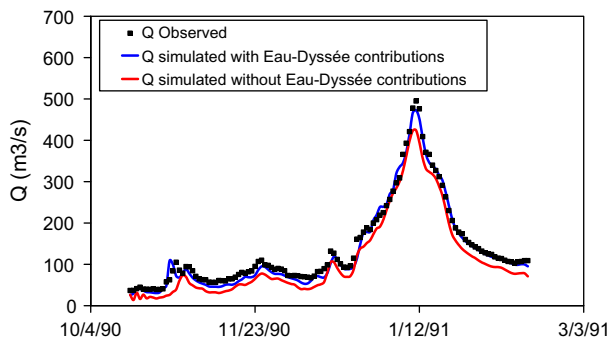


Fig. 5. HEC-RAS simulated discharge hydrographs compared to observations at Auvers sur Oise hydrometric station with and without lateral contributions from Eau-Dyssée.

4.2. Eau-Dyssée Simulations

In this part, the impacts of in-stream water level fluctuations and Q_{max} are characterized at local and regional scale comparing

Table 3

Overview of the main Eau-Dyssée simulations.

Simulation name	C0	C100	V0	V100
In-stream water level	Constant	Constant	Variable	Variable
Q_{max} (l s^{-1})	0	100	0	100

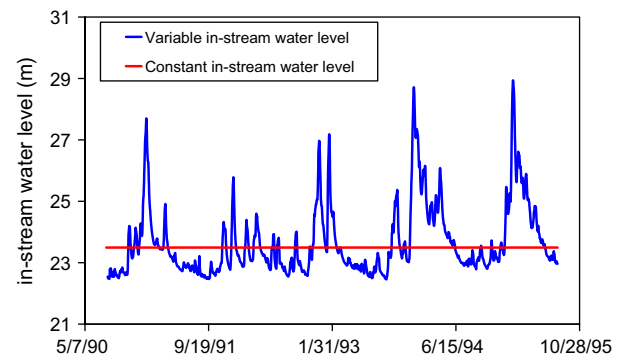


Fig. 6. Constant and variable in-stream water level located in the river cell draining the aquifer cell containing the Precy piezometer (Fig. 7).

four Eau-Dyssée simulations summarized in Table 3. The hydrodynamic parameters of Eau-Dyssée are taken from Gomez et al. (2003), calibrated assuming that $Q_{\text{max}} = 0 \text{ l s}^{-1}$ (Table 1). The hydrodynamic parameters remain unchanged for simulations C100 and V100 (Table 1) performed to assess the sensitivity to Q_{max} .

4.2.1. Stream-aquifer exchanges

4.2.1.1. Local scale analysis.

4.2.1.1.1. Impact of water level fluctuations. This analysis is conducted comparing simulated and observed piezometric heads at Precy (Fig. 2b). The Precy piezometer is located in the Chalk aquifer within a distance of 1.5 km from the river cell. It is the closest available piezometer to the stream in the simulated area.

In the river cell directly draining the Precy piezometer, the amplitude of the simulated river stage variations exceeds 6 m during the last 2 years of simulation, when river stage fluctuations are enabled (Fig. 6). This leads to a 1-m rise of the piezometric head in the Precy piezometer, which is more realistic than the 0.15 m rise obtained neglecting in-stream water level fluctuations (Fig. 7). Best improvements of the simulated piezometric head are obtained for the rising and falling limbs of 1994 and 1995 flood hydrographs.

The comparison of V0 with C0 and V100 with C100 also shows that each flood wave initiates an infiltration process from streams to aquifer units, significantly increasing the piezometric head at Precy (Fig. 7).

4.2.1.1.2. Impact of Q_{max} . The local impact of Q_{max} on stream-aquifer interactions is also explored (Eq. (3)). A sensitivity analysis of piezometric head distribution to Q_{max} is performed for both constant and variable in-stream water levels, with values of Q_{max}

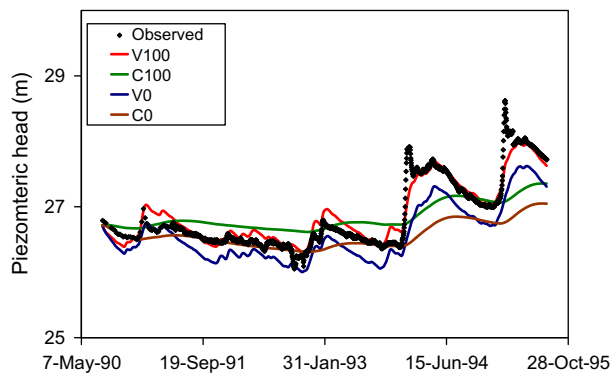


Fig. 7. Simulated ground-water levels in the Chalk aquifer cell containing the Precy piezometer using variable and constant in-stream water levels for Q_{max} values varying between 0 and 100 l s^{-1} (Table 3).

varying from 0 l s^{-1} (infiltration is not authorized) to 500 l s^{-1} in each river cell. The resulting simulated hydraulic heads are locally compared to observations in the Precy piezometer (Table 4).

Results show that the impact of Q_{max} on simulated piezometric heads is significant up to a value of 100 l s^{-1} , which leads to the best fit to observed piezometric head, especially when the variable river stage is enabled (Fig. 7). Rising Q_{max} beyond 100 l s^{-1} has negligible impact on simulated aquifer heads (Table 4).

Fig. 7 confirms the quality of the simulated heads when enabling variable river stage and river recharge to the aquifer (with $Q_{max} = 100 \text{ l s}^{-1}$). In this case, the river starts recharging underlying aquifer cells when river stage rises above the aquifer head which leads to a significant increase in simulated piezometric heads at local scale.

4.2.1.2. Regional scale analysis.

4.2.1.2.1. Effect of high frequency in-stream water stage fluctuations.

In this section, the spatial impact of stream water level fluctuations on piezometric head distributions in adjacent aquifer units is characterized at each aquifer cell by calculating the temporal mean absolute differences (MAD) between the piezometric heads (Eq. (10)) with and without taking into account high frequency in-stream water level fluctuations, given a Q_{max} of 100 l s^{-1} (i.e. comparing V100 & C100).

Table 4
Local impact of Q_{max} on simulated aquifer piezometric heads compared with measurements at Precy piezometer.

$Q_{max} (\text{l s}^{-1} \text{ km}^{-2})$	In-stream water level	Average observed heads (m)	Average simulated heads (m)	BIAS (m)	RMSE (m)	ρ	σ_{obs} (m)	σ_{sim} (m)
0	Variable	26.9	26.6	−0.30	0.36	0.95	0.56	0.46
0	Constant	26.9	26.6	−0.30	0.52	0.83	0.56	0.20
50	Variable	26.9	26.8	−0.10	0.2	0.96	0.56	0.50
50	Constant	26.9	26.7	−0.20	0.43	0.85	0.56	0.22
100*	Variable	26.9	26.9	0.03	0.16	0.97	0.56	0.50
100	Constant	26.9	26.8	−0.025	0.4	0.86	0.56	0.22
150	Variable	26.9	26.9	0.081	0.18	0.97	0.56	0.48
150	Constant	26.9	26.9	0.012	0.39	0.86	0.56	0.22
250	Variable	26.9	27	0.099	0.18	0.97	0.56	0.49
250	Constant	26.9	27	0.028	0.39	0.86	0.56	0.22
500	Variable	26.9	27	0.099	0.18	0.97	0.56	0.49
500	Constant	26.9	27	0.028	0.39	0.86	0.56	0.22

* Best simulation.

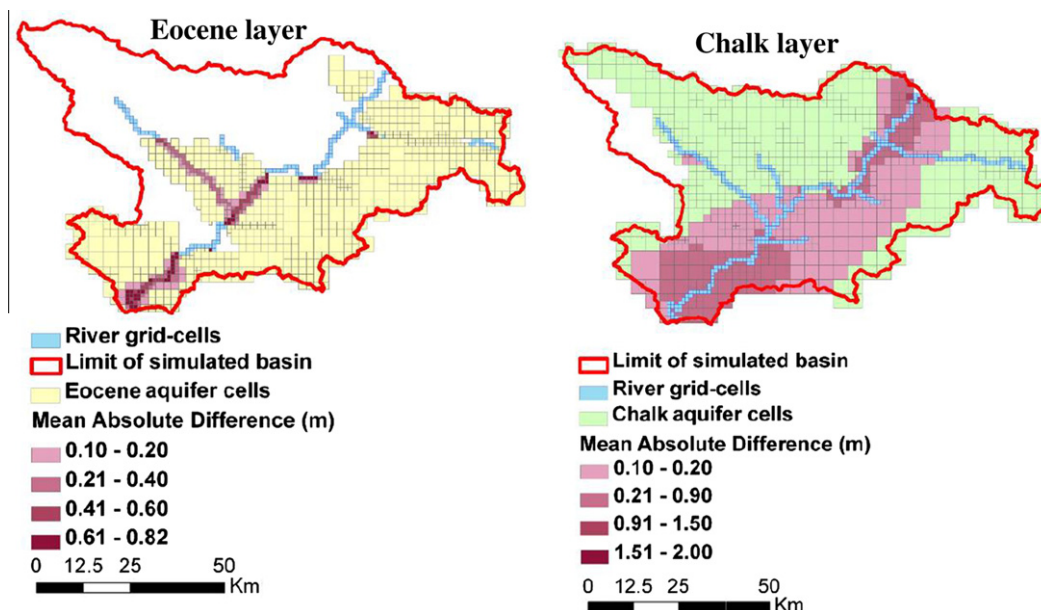


Fig. 8. Mean absolute difference between piezometric heads of two simulations based on constant and variable in-stream water levels (1/August/1990–31/July/1995).

$$MAD = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |H_{fix}(t_i) - H_{var}(t_i)| \quad (10)$$

where $H_{fix}(t_i)$ is the simulated piezometric head at a given time (Δt) using a constant in-stream water level, $H_{var}(t_i)$ is the simulated piezometric head using variable in-stream water levels and N is the number of time steps.

The spatial distribution of MAD varies from a few centimeters to more than 1.9 m in aquifer grid-cells close to the main stream (Fig. 8.). As expected, the influence of fluctuating water levels on piezometric head decreases with distance to the stream. The area influenced by river stage fluctuations extends over 3 km around the river for the Eocene aquifer unit and over 20 km for the Chalk

aquifer unit (Fig. 8). The influence of river stage fluctuations is broader in the Chalk aquifer unit because it is confined by the overlying Eocene aquifer unit. In terms of storage capacity, the one of the Chalk aquifer unit is three time lower than the one of the Eocene aquifer unit (in average 0.035 and 0.09 respectively), what leads to a smaller wave attenuation with distance for the Chalk aquifer unit.

4.2.1.2.2. Sensitivity to Q_{max} . To assess the impact of river infiltration to aquifer units at the regional scale, simulated piezometric heads distant from the main streams for scenarios V0 and V100 (Table 2) are compared with the observed ones when available (Figs. 2b and 9). The comparison demonstrates that river infiltra-

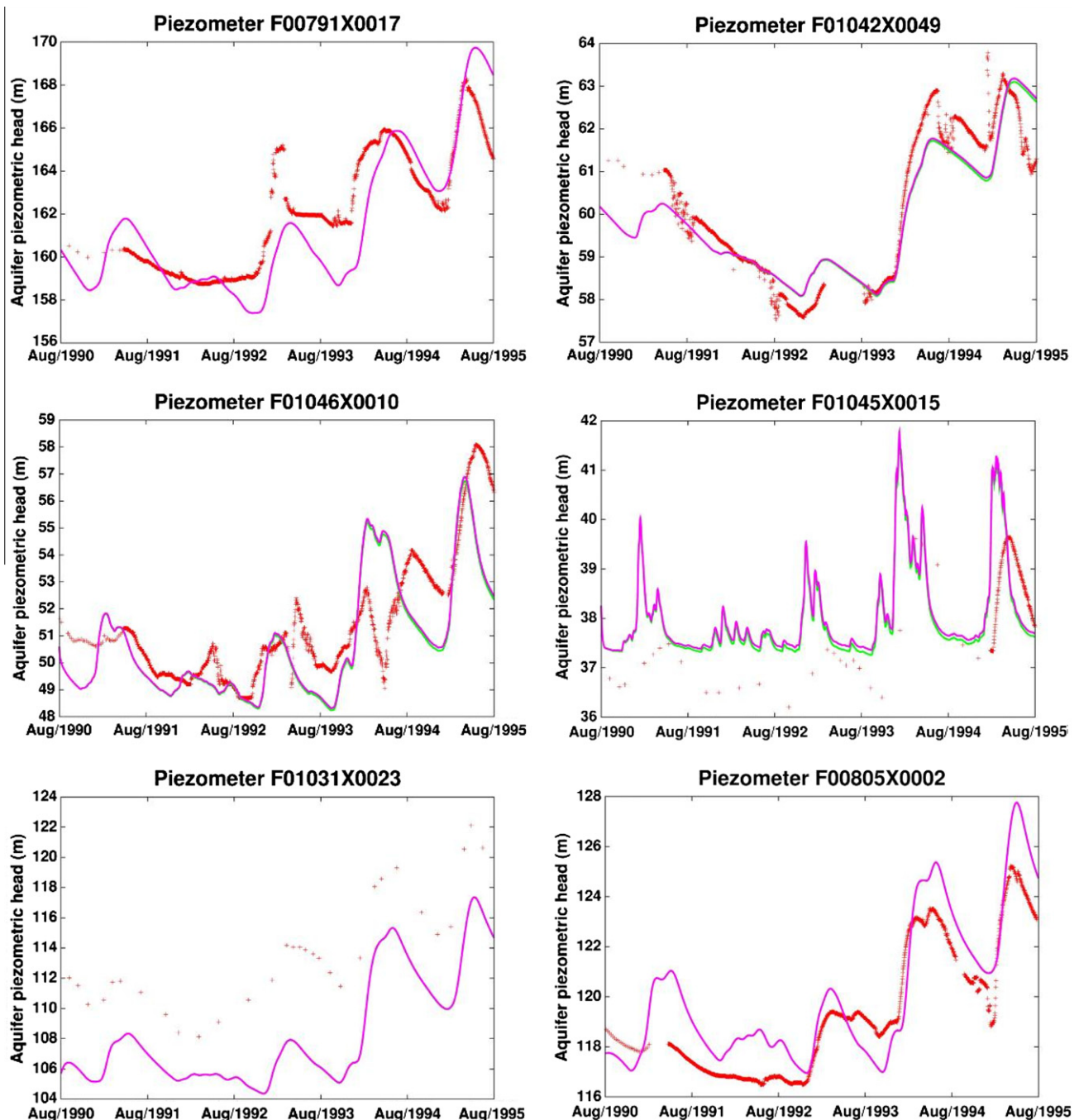


Fig. 9. Comparison of aquifer piezometric heads simulated by Eau-Dyssée with variable river stage (using two values of Q_{max} ; pink line: V0; green line: V100) to observations in 6 piezometers (red crosses). (For interpretation of the references to colours in this figure legend, the reader is referred to the web version of this paper.)

tion has a negligible impact on piezometric head distribution at the regional scale.

4.2.2. Simulated discharge and river stage by the regional hydro(geo)logical model Eau-Dyssée

Discharge and water level hydrographs are simulated by the regional model Eau-Dyssée after implementing the new methodology of in-stream water level fluctuations. These simulations use the same upstream boundary conditions (observed discharge hydrographs) used to construct the hydraulic model HEC-RAS.

In-stream discharges and water levels simulated by Eau-Dyssée are visually in agreement with observations in terms of hydrograph shape and timing of peaks (e.g. at Sarron, Fig. 4).

5. Quantification of stream-aquifer exchange

The exchanged fluxes between streams and aquifer units are assessed based on Eq. (11) for four different scenarios (Table 3) during the period of simulation (1/August/1990–31/July/1995):

$$\text{Net exchanged flux} = \text{Aquifer exfiltration} - \text{River infiltration} \quad (11)$$

Therefore, a positive net exchanged flux means that the overall exfiltrated volume of water by the aquifer units is higher than river infiltration, and vice versa.

The net exchange is positive for all simulations, which means that on the whole, the aquifer system sustains the river network.

To assess the impact of Q_{max} on the exchanges between streams and aquifer units, scenarios V0 & V100 are compared (Fig. 10a). The comparison shows that the infiltration flux from the rivers to the aquifer units has no impact on the net stream-aquifer exchanges. The main impact is a dynamical one due to the volume of the infiltrated flux from river to aquifer unit during in-stream high flow periods which eventually involves a longer transfer time in aquifer units close to the river network that corresponds to an increase of the water stored in the aquifer system.

To assess globally the impact of in-stream water level fluctuations on exchanged stream-aquifer flux, scenarios V100 & C100 are compared. The comparison (Fig. 10a) shows that fluctuations of in-stream water level slightly modifies the net stream-aquifer exchanges. The exchanged flux from aquifer units to streams slightly increases, while the exchanged one from stream to aquifer units also increases leading to a net exchange of 37.7 mm yr^{-1} , which remains almost unchanged.

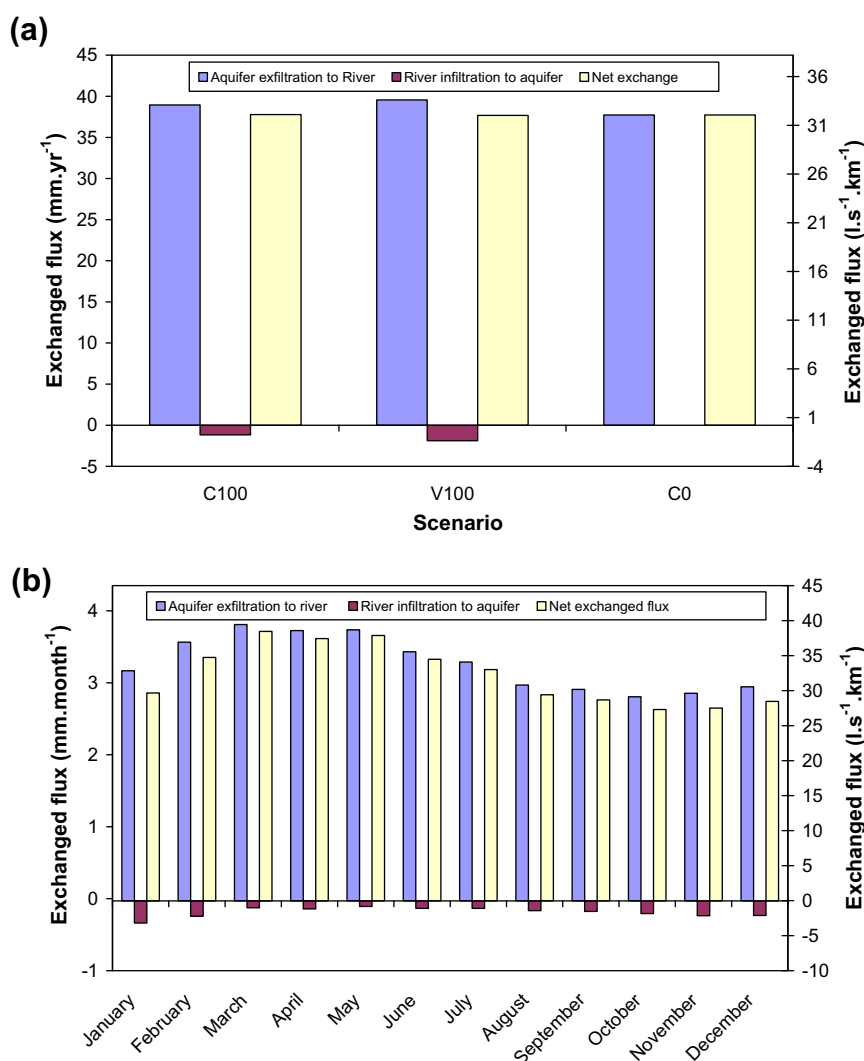


Fig. 10. (a) Comparison of the net river-aquifer flux and its components (Eq. (11)) between the four simulations of Table 3. The fluxes are expressed in cumulated volume over the 4-year simulation period (mm yr^{-1}) and the mean linear stream-aquifer exchanged flux for each 1 km ($\text{l s}^{-1} \text{ km}^{-1}$), (b) average monthly linear exchanged flux and the mean linear stream-aquifer exchanged flux for each 1 km for scenario V100.

Finally, the mean monthly stream-aquifer exchange dynamics is analyzed based on scenario V100 (Fig. 10b). The minimum of net exchanges occurs in October ($2.6 \text{ mm month}^{-1}$) which corresponds to low water piezometric level and to the beginning of the hydrological year. From October to January infiltrated water from rivers towards aquifer units increases from $0.18 \text{ mm month}^{-1}$ to $0.31 \text{ mm month}^{-1}$. While January corresponds to the maximum of infiltration ($3.2 \text{ l s}^{-1} \text{ km}^{-1}$ of river stretch), it appears on Fig. 10b that the recharge of the aquifer system is not only due to infiltration from the river network but to the recharge from the impluvium so that high water piezometric level is only reached in March when the flux from aquifer units to rivers is maximum ($3.8 \text{ mm month}^{-1}$). During the rising of piezometric level in aquifer units, the infiltrated flux from rivers to aquifer units decreases, reaching a minimum of $0.1 \text{ mm month}^{-1}$ in March. During spring, the net exchanges are maximum and the exfiltration from the aquifer system prevails. During summer the river network mostly drains the aquifer system which leads to the low water piezometric level in late August. Interesting is that the later in the summer, the more the summer storms impact the water content of the aquifer system because infiltrated water from rivers to aquifer units increases from $0.1 \text{ mm month}^{-1}$ in May to $0.15 \text{ mm month}^{-1}$ in September.

6. Conclusions and perspectives

In this study, a 1D physically-based hydraulic model is used as a spatial and temporal interpolator of river stages and river discharges along a whole river network. The resulting rating curves, which provide a continuous description of reality given the available information, are upscaled to the coarser resolution of a regional scale hydrogeological model, where they are used to deduce river stage from the simulated discharge at each time step and in each river grid-cell.

The approach was tested for a 188-km river network in the Oise River basin. The simulated regional river stages were almost as realistic as the ones from the local 1D hydraulic model. Fluctuating river stages have a significant impact on the underlying aquifer system, especially if stream water infiltrates towards the aquifer system ($Q_{\text{max}} = 100 \text{ l s}^{-1}$). Highest infiltration rates occur during winter when floods propagate in the river network, leading to an increase of in-stream water stages. The area influenced by fluctuating river stages extends across 3–20 km around the streams, depending on the hydrogeological setting (confined/unconfined) of the aquifer unit.

This paper confirms that surface and groundwater models should not be treated separately because they are connected components of the hydrosystem, especially in large sedimentary basins as the one of the Oise River. The upscaling method offers an efficient way to improve the physics of the stream-aquifer interactions at the regional scale, with a limited computational burden owing to the pre-computation of the rating curves. Thus, it offers interesting perspectives to assess the impacts of environmental changes on hydrosystems, such as climate change (Ducharme et al., 2007, 2010), nitrate contamination from agricultural practices (Ledoux et al., 2007). The approach is also interesting for modeling wetlands which are often located at the contact zone between groundwater and in-stream waters (Curie et al., 2009).

Furthermore, the approach offers an interesting way to benefit from river stage remote-sensing measurements (Alsdorf et al., 2007; Neal et al., 2009; Biancamaria et al., 2010) to constrain hydrological modeling, with increasing coverage, precision, and temporal resolution.

The functional curves approach could also be generalized to account for variable river velocity in regional scale hydrological models. The advantage of the proposed method would be to benefit

from the complete physics offered by the hydraulic model (Saint-Venant equations) and from high resolution morphological data, but with a significant spare of computational time in the regional model, owing to the pre-computation of the functional curves. The approach could even be further generalized to account for floods in regional hydrological models, by defining functional curves derived from a 2D hydraulic modeling.

Acknowledgements

This work was supported by the PIREN-Seine research program on the Seine basin and by the Centre National des Oeuvres Universitaires et Scolaires (CNOUS). We are grateful for the data provided by the Direction Régionale de l'Environnement Ile de France (DIREN) and by Météo-France. We also kindly thank Michel Poulin for his useful advices.

References

- Abbott, M.B., Bathurst, J.C., Cunge, J.A., O'Connell, P.E., Rasmussen, J., 1986. An introduction to the European hydrological system -Système Hydrologique Européen, SHE. 2. Structure of a physically-based, distributed modeling system. *Journal of Hydrology* 87, 61–77.
- Akan, A.O., Yen, B.C., 1981. Mathematical model of shallow water flow over porous media. *Journal of the Hydraulics Division ASCE* 107 (HY4), 479–494.
- Alsdorf, D., Rodriguez, E., Lettenmaier, D., 2007. Measuring surface water from space. *Reviews of Geophysics* 45 (2), RG2002.
- Ambroise, B., Perrin, J.L., Reutenauer, D., 1995. Multi-criterion validation of a semi-distributed conceptual model of the water cycle in the Fecht catchment (Vosges Massif, France). *Water Resources Research* 31 (6), 1467–1481.
- Anderson, E.I., 2003. An analytical solution representing groundwater-surface water interaction. *Water Resources Research* 39 (3), 1071.
- Aral, M.M., Gunduz, O., 2003. Scale effects in large scale watershed modeling. In: Singh, V.P., Yadava, R.N., Editors, *Advances in Hydrology, Proceedings of the International Conference on Water and Environment*: WE, Allied Publishers, India, 37–51.
- Beven, K.J., Binley, A.M., 1992. The future of distributed models: model calibration and uncertainty prediction. *Hydrological Processes* 6, 279–298.
- Biancamaria, S., Andreadis, K.M., Durand, M., Clark, E.A., Rodriguez, E., Mognard, N., Alsdorf, D., Lettenmaier, D.P., Oudin, Y., 2010. Preliminary characterization of SWAT hydrology error budget and global capabilities. *Journal of Selected Topics in Earth Observations and Remote Sensing* 3 (1), 6–19.
- Blasch, K., Ferré, T.P.A., Offmann, J., Pool, D., Bailey, M., Cordova, J., 2004. Processes controlling recharge beneath ephemeral streams in southern Arizona. In: Hogan, J.F., Phillips, F.M., Scanlon, B.R. (Eds.), *Ground-Water Recharge in Desert Environments: The Southwestern United States*. American Geophysical Union, Washington DC, pp. 69–76.
- Boukema, B., 1987. Modélisation des écoulements superficiels et souterrains dans le sud Ouest de la France: Approche du bilan hydrique. PhD Thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Chow, V.T., 1959. *Open-channel Hydraulics*. McGraw-Hill, New York.
- Cooper H. H., Rorabaugh M. I., 1963. Groundwater movements and bank storage due to flood stages in surface streams. *USGS Water Supply Paper* 1536-J, pp. 343–366.
- Cunningham, A.B., Sinclair, P.J., 1979. Application and analysis of a coupled surface and groundwater model. *Journal of Hydrology* 43, 129–148.
- Curie, F., Ducharme, A., Sebilo, M., Bendjoudi, H., 2009. Denitrification in a hyporheic riparian zone controlled by river regulation in the Seine River basin (France). *Hydrological Processes* 23, 655–664.
- David, C., Habets, F., Maidment, D. R., 2010. Rapid applied to the SIM-France model. Submitted to *Journal of Hydrological Processes* (revision phase).
- de Marsily, G., 1986. *Quantitative Hydrogeology*. Academic Press, New York.
- De Roo, A.P.J., Wesseling, C.G., Van Deursen, W.P.A., 2000. Physically based river basin modeling within a GIS: the LISFLOOD model. *Hydrological Processes* 14, 1981–1992.
- Ducharme, A., Baubion, C., Beaudoin, N., Benoit, M., Billen, G., Brisson, N., Garnier, J., Kieken, H., Lebonvallet, S., Ledoux, E., Mary, B., Mignolet, C., Poux, X., Sauboua, E., Schott, C., Théry, S., Viennot, P., 2007. Long term prospective of the Seine river system: Confronting climatic and direct anthropogenic changes. *Science of the Total Environment* 375, 292–311.
- Ducharme, A., Habets, F., Pagé, C., Sauquet, E., Viennot, P., Déqué, M., Gascoin, S., Hachour, A., Martin, E., Oudin, L., Terray, L., Thiéry, D., 2010. Climate change impacts on water resources and hydrological extremes in Northern France. In: *Proceedings of XVIII International Conference on Water Resources, Barcelona*.
- Flipo, N., Poulin, M., Even, S., Ledoux, E., 2005. Hydrological part of CAWAQS (Catchment Water Quality Simulator): fitting on a small sedimentary basin. *Proceedings of the SIL, Lahti. Verh. Internat. Verein. Limnol.* 29 (2), 768–772.
- Flipo, N., Even, S., Poulin, M., Théry, S., Ledoux, E., 2007a. Modeling nitrate fluxes at the catchment scale using the integrated tool CAWAQS. *Science of the Total Environment* 375, 69–79.

- Flipo, N., Jeannée, N., Poulin, M., Even, S., Ledoux, E., 2007b. Assessment of nitrate pollution in the Grand Morin aquifers (France): combined use of geostatistics and physically-based modelling. *Environmental Pollution* 146 (1), 241–256.
- Freeze, R.A., 1972. Role of subsurface flow in generating surface runoff: 1 Base flow contributions to channel flow. *Water Resources Research* 8 (3), 609–623.
- Gomez, E., Ledoux, E., Viennot, P., Mignolet, C., Benoit, M., Bornerand, C., Schott, C., Mary, B., Billen, G., Ducharme, A., Brunstein, D., 2003. Un outil de modélisation intégrée du transfert des nitrates sur un système hydrologique: application au bassin de la Seine. *La Houille Blanche*, No. 3/2003.
- Graham, D. N. and Refsgaard A., 2001. MIKE SHE: A Distributed, Physically based Modelling System for Surface Water/Groundwater Interactions. MODFLOW 2001 and other modelling Odysseys Conf., Golden, Colorado, 11–14.
- Gunduz, O., Aral, M.M., 2005. River networks and groundwater flow: simultaneous solution of a coupled system. *Journal of Hydrology* 301 (1–4), 216–234.
- Habets, F., Etchevers, P., Golaz, C., Leblois, E., Ledoux, E., Martin, E., Noilhan, J., Ottlé, C., 1999. Simulation of the water budget and the river flows of the Rhône basin. *Journal of Geophysical Research* 104 (D24), 31145–31172.
- Habets, F., Gascoin, S., Korkmaz, S., Thiéry, D., Zribi, M., Amraoui, N., Carli, M., Ducharme, A., Leblois, E., Ledoux, E., Martin, E., Noilhan, J., Ottlé, C., Viennot, P., 2010. Multi-model simulation of a major flood in the groundwater-fed basin of the Somme River (France). *Journal of Hydrology and Earth System Sciences* 4 (1), 99–117.
- Harbaugh, A.W., McDonald, M.G., 1996. User's Documentation for MODFLOW-96, an Update to the US Geological Survey Modular Finite-Difference Ground-Water Flow Model, US Geological Survey, Open-File Report 96-485.
- HEC, 2002. River analysis system (HEC-RAS) User's Manual. Hydrologic Engineering Center (HEC), US Army Corps of Engineers, Davis, California.
- Henderson, R.D., Day-Lewis, F.D., Harvey, C.F., 2009. Investigation of aquifer–estuary interaction using wavelet analysis of fiber-optic temperature data. *Geophysical Research Letters* 36 (6), L06403.
- Hill, M.C., 2006. The practical use of simplicity in developing ground water models. *Ground Water* 44 (6), 775–781.
- Hunt, R. J., Walker, J. F., Westenbroek, S., Doherty, J., 2008. Hydrologic climate change from a deterministic view: Using GSFLOW to simulate climate change in a northern temperate climate. In: 2nd USGS Modeling Conference, Orange Beach, Ala., US Geological Survey.
- Julien, P.Y., Saghaian, B., Ogden, F.L., 1995. Raster-based hydrologic modeling of spatially-varied surface runoff, color. *Water Resources Bulletin* AWRA 31 (3), 523–536.
- Knebl, M.R., Yang, Z.L., Hutchison, K., Maidment, D.R., 2005. Regional scale flood modeling using NEXRAD rainfall, GIS, and HEC-HMS/RAS: a case study for the San Antonio River Basin Summer 2002 storm event. *Journal of Environmental Management* 75, 325–336.
- Kollet, J., Maxwell, R., 2006. Integrated surface–groundwater flow modeling: A free-surface overland flow boundary condition in a parallel groundwater flow model. *Advances in Water Resources* 29, 945–958.
- Lange, J., 2005. Dynamics of transmission losses in a large arid stream channel. *Journal of Hydrology* 306 (1–4), 112–126.
- Ledoux, E., 1980. Modélisation intégrée des écoulements de surface et des écoulements souterrains sur un bassin hydrologique. PhD Thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Ledoux, E., Girard, G., Villeneuve, J.P., 1984. Proposition d'un modèle couplé pour la simulation conjointe des écoulements de surface et des écoulements souterrains sur un bassin hydrologique. *La Houille Blanche* 101, 110.
- Ledoux, E., Girard, G., de Marsily, G., Villeneuve, J.P., Deschenes, J., 1989. Spatially distributed modeling: conceptual approach, coupling surface water and groundwater. In: Morel-Seytoux, H.J. (Ed.), *Unsaturated flow in hydrologic modeling – theory and practice*. Kluwer Academic, NATO ASI Ser. C/Norwell, Massachusetts, pp. 435–454.
- Ledoux, E., Gomez, E., Monget, J.M., Viavattene, C., Viennot, P., Ducharme, A., Benoit, M., Mignolet, C., Schott, C., Mary, B., 2007. Agriculture and groundwater Nitrate Contamination in the Seine Basin. The STICS-MODCOU modelling chain.. *Science of the Total Environment* 375, 33–47.
- Markstrom, S.L., Niswonger, R.G., Regan R.S., Prudic, D.E., Barlow, P.M., 2008. GSFLOW – Coupled ground-water and surface-water flow model based on the integration of the precipitation-runoff modeling system (PRMS) and the modular ground-water flow model (MODFLOW-2005): US Geological Survey Techniques and Methods 6(D1), 240.
- Meyboom, P., 1961. Estimating ground-water recharge from stream hydrographs. *Journal of Geophysical Research* 66 (4), 1203–1214.
- Monteil, C., Flipo, N., Poulin, M., Habets, F., Krimissa, M. and Ledoux, E., 2010. Assessing the contribution of the main aquifer units of the Loire Basin to river discharge during low flow. In: *Proceedings of XVIII International Conference on Water Resources*, Barcelona.
- Montgomery Watson, 1993. Integrated Groundwater and Surface Water Model Documentation and User Manual.
- Morita, M., Yen, B.C., 2002. Modeling of conjunctive two dimensional surface-three dimensional subsurface flows. *Journal of Hydraulic Engineering ASCE* 128 (2), 184–200.
- Nash, J.E., Sutcliffe, J.V., 1970. River flow forecasting through conceptual models part I-A discussion of principles. *Journal of Hydrology* 10 (3), 282–290.
- Neal, J., Schumann, G., Bates, P., Buytaert, W., Matgen, P., Pappenberger, F., 2009. A data assimilation approach to discharge estimation from space. *Hydrological Processes* 23 (25), 3641–3649.
- Pinder, F.G., Jones, J.F., 1969. Determination of the groundwater component of peak discharge from the chemistry of total runoff. *Water Resources Research* 5 (2), 438–445.
- Pinder, G.F., Sauer, S.P., 1971. Numerical simulation of flood wave modification due to bank storage effects. *Water Resources Research* 7 (1), 63–70.
- Polus, E., Flipo, N., de Fouquet, C., Poulin, M., 2011. Geostatistics for assessing the efficiency of distributed physically-based water quality model. Application to nitrates in the Seine River. *Hydrological Processes* 25 (2), 217–233. doi:10.1002/hyp.7838.
- Quintana-Seguí, P., Le Moigne, P., Durand, Y., Martin, E., Habets, F., Baillon, M., Franchisteguy, L., Morel, S., Noilhan, J., 2008. The SAFRAN atmospheric analysis: description and validation. *Journal of Applied Meteorology and Climatology* 47, 92–107.
- Refsgaard, J.C., Storm, B.J., 1995. MIKE SHE. In: Singh, V.P. (Ed.), *Computer Models of Watershed Hydrology*. Water Resources Publications, pp. 9–846.
- Rodell, M., Houser, P.R., Berg, A.A., Famiglietti, J.S., 2005. Evaluation of 10 methods for initializing a land surface model. *Journal of Hydrometeorology* 6, 146–155.
- Rushton, K., 2007. Representation in regional models of saturated river-aquifer interaction for gaining/losing rivers. *Journal of Hydrology* 334 (1–2), 262–281.
- Saleh, F., 2010. Contribution of 1D local hydraulic modeling to improve simulations of river stages and stream-aquifer interactions at regional scale. PhD thesis, University Pierre et Marie Curie (Paris VI).
- Sanford, W., 2002. Recharge and groundwater models: an overview. *Hydrogeology Journal* 10 (1), 110–120.
- Smith, A.J., Townley, L.R., 2002. Influence of regional setting on the interaction between shallow lakes and aquifers. *Water Resources Research* 38 (9), 1170.
- Smith, A.J., Turner, J.V., 2001. Density-dependent surface water-groundwater interaction and nutrient discharge in the Swan-Canning Estuary. *Hydrological Processes* 15 (13), 2595–2616.
- Smith, R.E., Woolhiser, D.A., 1971. Overland flow on an infiltrating surface. *Water Resources Research* 7 (4), 899–913.
- Sophocleous, M., 2002. Interactions between groundwater and surface water: the state of the science. *Hydrogeology Journal* 10, 52–67.
- Swain, E.D., Wexler, E.J., 1996. A Coupled Surface-Water and Ground-Water flow Model (MODBRANCH) for Simulation of Stream-Aquifer Interaction: US Geological Survey Techniques of Water-Resources Investigations, Book 6, Chapter A6.
- Thierion, C., Habets, F., Ledoux, E., Viennot, P., Martin, E., Queguiner, S., Ackerer, P., Majdalani, S., Leblois, E., Lecluse, S., 2010. Modelling the coupled surface water and ground water system of the upper Rhine graben, proceedings of XVIII International Conference on Water Resources, Barcelona.
- Thompson, J.R., Sørensen, H., Refstrup, H., Gavin, H., Refsgaard, A., 2004. Application of the coupled MIKE SHE/MIKE 11 modelling system to a lowland wet grassland in southeast England. *Journal of Hydrology* 293, 151–179.
- Uhlenbrook, S., Seibert, J., Rodhe, A., Leibundgut, Ch., 1999. Prediction uncertainty of conceptual rainfall-runoff models caused by problems to identify model parameters and structure. *Journal of Hydrological Science* 44 (5), 279–299.
- VanderKwaak, J. E., 1999. Numerical Simulation of Flow and Chemical Transport in Integrated Surface-Subsurface Hydrologic Systems, PhD Thesis, University of Waterloo, Ontario, Canada.
- Walker, J.F., Hunt, R.J., Markstrom, S.L., Hay, L.E., Doherty, J., 2008. Using a Coupled Groundwater/Surface-Water Model to Predict Climate-Change Impacts to Lakes in the Trout Lake Watershed, Northern Wisconsin. The third Interagency Conference on Research in the Watersheds, Estes Park, CO.
- Winter, T.C., 1995. Recent advances in understanding the interaction of groundwater and surface water. *Reviews of Geophysics* 33 (S1), 985–994.
- Winter, T.C., 1998. Relation of streams, lakes, and wetlands to Research groundwater flow systems. *Hydrogeology Journal* 7 (1), 28–45.
- Winter, T.C., 2002. Subaqueous capping and natural recovery: understanding the hydrogeologic setting at contaminated sites. *DOER Technical Notes Collection (TNDOER-C26)*, US, Army Engineer Research and Development Center, Vicksburg, MS.

- D.4** [Flipo et al. \(2007c\)](#) Modelling nitrate fluxes at the catchment scale using the integrated tool CaWaQS. *Sci Total Environ* 375, 69–79

Modeling nitrate fluxes at the catchment scale using the integrated tool CAWAQS

Nicolas Flipo^{a,*}, Stéphanie Even^a, Michel Poulin^a, Sylvain Théry^b, Emmanuel Ledoux^a

^a Centre de Géosciences, UMR Sisyphe, ENSMP, 35, rue Saint-Honoré, F-77305, Fontainebleau, France

^b UMR Sysiphe, Université Pierre et Marie Curie Paris VI, Boîte 123, 4 place Jussieu, Tour 56, Couloir 46-56, 3ème étage, F-75252 Paris Cedex 05, France

Available online 28 February 2007

Abstract

Nitrates fluxes in the Grand Morin basin (1200 km²), that is subjected to intense agricultural pressure, are considered using in-stream observations (around 250 sampling days over 5 years) and physically based simulations using the CAWAQS model (CATCHment WATER Quality Simulator). In-stream nitrate concentration averaged 6 mg N L⁻¹, increasing by approximately 0.2 mg N L⁻¹ yr⁻¹ around this value (period 1991–1996). Our results show that, over the period of 1991–1996, the differences between in-stream observed nitrate concentrations and simulated nitrate concentrations result from nitrate losses at the basin scale. These losses are due to denitrification by transfer through wetlands, alluvial plains, the hyporheic zone, and by benthic processes in rivers. A mean annual mass balance at the basin scale indicates that 40% of the infiltration flux (3360 kg N km⁻² yr⁻¹) is removed from the system via the river network, 40% is stored in aquifers and 20% is lost by denitrification (period 1991–1996).

© 2006 Elsevier B.V. All rights reserved.

Keywords: Water quality; Modeling; Nitrogen; Denitrification; Nitrate; Agriculture; Fluxes

1. Introduction

Nitrate is a major nutrient, favoring plant and algae growth and leading to eutrophication of water bodies (Garnier et al., 1995, 1998; Jarvie et al., 2005). In highly eutrophicated systems, dramatic events can lead to lethal conditions for fish communities (Boët et al., 1999).

In many parts of the world nitrate concentrations exceed the potability thresholds, which is 50 mg NO₃ L⁻¹ in Europe (Billen and Garnier, 1999; Billen et al., 2001,

2005; Cinnirella et al., 2005; de Wit and Bendoricchio, 2001; Garnier et al., 2005; Fazal et al., 2005; Jarvie et al., 2005; Lasserre et al., 1999; McLay et al., 2001; Vinten and Dunn, 2001). These rising nitrate concentrations in groundwater have lead to water supply difficulties or pollution of drinking water (de Wit and Bendoricchio, 2001; Joosten et al., 1998; Molénat and Gascuel-Odoux, 2002). Thus, rising nitrate concentrations in surface and groundwater, mainly due to agricultural practices, are of concern for many regions of the world submitted to intensive agriculture (Spalding and Exner, 1993).

However the extent and the location of nitrate removal is of practical importance for management actions aimed at reducing nitrate pollution of surface water. As nitrate is reactive in the ecosystem, it is necessary to know the nitrate inputs and to understand

* Corresponding author. Department of Geological and Environmental Sciences, 450 Serra Mall, Braun Hall, Building 320, Stanford University, Stanford, CA 94305-2115, United States. Tel.: +1 650 736 7179; fax: +1 650 725 0979.

E-mail address: flipo@pangea.stanford.edu (N. Flipo).

the transport and transformation processes in each compartment of the basin. Nitrogen budgets established for large river systems in North America and in Europe reveal that a significant part of infiltrating nitrogen is removed from the basin during the transfer through the basin (Billen and Garnier, 1999; Billen et al., 2001, 2005; Boyer et al., 2002; Howarth et al., 1996; Sebilo, 2003; Seitzinger et al., 2002; Van Breemen et al., 2002; Wriedt, 2004; Wriedt et al., 2005).

Within the PIREN SEINE research program (<http://www.sisyphe.jussieu.fr/internet/piren/>), the nitrate contamination of the Seine basin (30% of the french agricultural production) has been considered for the past 10 years. A database was built defining agricultural practices on agricultural districts of approximately 100 km² (Benoît et al., 2000; Mignolet et al., 2004). This database was used to run the model STICS (Brisson et al., 1998) and STICS was coupled with the hydrological and hydrogeological model MODCOU (Ledoux et al., 1984) to simulate the nitrate increase rates during the last 30 years in the Marne aquifer system (Gomez et al., 2003). At the same time the denitrification potential of riparian zone was considered at large scale using isotopic composition of ¹⁵N–NO₃[−] (Sebilo, 2003; Sebilo et al., 2003). Even with this method, denitrification processes are difficult to locate at the basin scale. Denitrification may occur either in bed sediments of river after migration of water column nitrate through the benthic interface, or during hyporheic flow through gravel bed underlying the channel, or within riparian zones that surface runoff and groundwater have to pass through before reaching the river.

The aim of this paper is to refine these large scale approaches to the Grand Morin basin, a sub basin of the Seine River, in order to quantify more precisely the nitrogen losses at the basin scale. To reach this goal, the modeling tool CAWAQS (CATCHment Water Quality Simulator) is used.

Many nitrogen simulation models have been developed in the past three decades, and some reviews can be found in the literature (Arheimer and Olsson, 2003; Diekkrüger et al., 1995; Flipo, 2005; Kauark-Leite, 1990). Global conceptual models, representing the basin – or the sub-basins – as a homogenous entity, are not adequate to take into account some spatially distributed processes (Beaujouan et al., 2001). The adequate models to study these spatial interactions must be process based and spatially distributed. More precisely, they must simulate fairly accurately subsurface lateral flow, nitrogen transformations in soil, and plant nitrogen uptake. Complex, mechanistic hydrological models such as SHE (Abbott et al., 1986a,b) can be coupled with crop growth and

nitrogen transformation models (Ewen et al., 2000; Lunn et al., 1996; Moxey and White, 1998; Refsgaard et al., 1998, 1999). Even if these kinds of models have powerful predictive ability, they have been considered too complex without guarantee of better performance (Beven, 1989). The main point is that physically based models are suffering from a lack of adequate validation.

The goal of this study is to estimate accurately the nitrate flux within the basin, which involves to use a fully distributed physically based model. Particular attention was paid to validate nitrate concentration in aquifers simulated by the physically based model CAWAQS (Flipo, 2005; Flipo et al., 2005) using geostatistics (Flipo et al., *in press*). As nitrate concentrations in rivers are linked to nitrate concentrations in their associated aquifer systems, the validation of nitrate concentrations in the aquifer systems enhances the credibility of physically based simulations and partly addresses previous scepticism. Following the important validation work we have chosen to use the modeling tool CAWAQS to assess nitrate losses at the catchment scale. CAWAQS is mainly physically based and results from the coupling of the three models STICS-NEWSAM-PROSE and from the use of the PIREN SEINE databases.

2. Materials and methods

2.1. Site description

The Grand Morin (France) is a tributary of the Marne river, 35 km east of Paris (Fig. 1). The Grand Morin basin is subjected to intense agriculture pressure. The agriculture represents 76% of the basin surface, whereas forests and urban areas represent 19 and 5% of the basin surface, respectively. According to Brunstein (1999) and Flipo (2005), around 40% of the cultivated area is covered by wheat. The other cultures evolved between 1988 and 2000. For instance in 1988, corn and pea were each covering 13% of the basin surface, whereas they were each covering 7% in 2000. In 2000, colza and barley were each covering 10% of the basin surface. The most frequent soil texture is silt (48%), followed by calcareous material (26%), alluvial deposits (14%) and clay (12%).

This basin was studied previously for different purposes and is therefor well documented. The CEMA-GREF instrumented the basin of Orgeval (100 km²) since the beginning of the 1960's. The limnimetric station of Pommeuse is a station of reference for flood forecasting. Within the framework of the European project ISMAP (ISMAP, 1997), the pesticide and nitrate concentrations of the rivers were regularly sampled. Moreover many

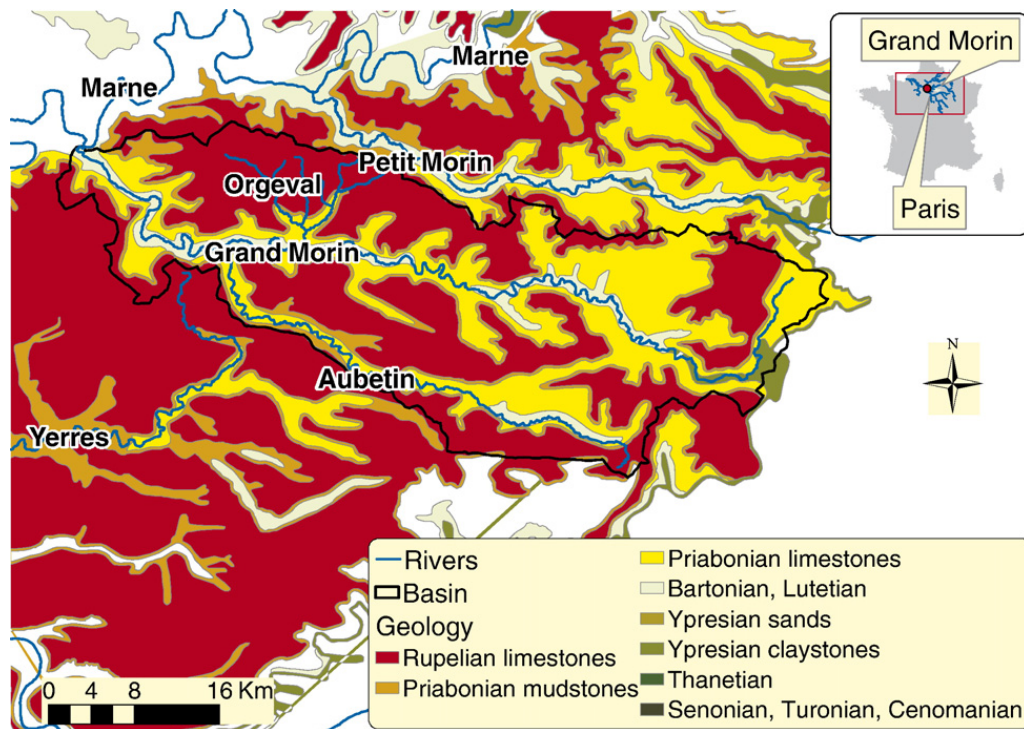


Fig. 1. The Grand Morin in its geological context.

data have been collected on the Grand Morin since the beginning of the PIREN SEINE (Brunstein, 1999; Flipo, 2005; Penven et al., 1998; Poulin et al., 2002).

The total length of the Grand Morin is about 120 km. The basin area is 1200 km². At low flow, the mean discharge at Pommeuse (represents a drainage area of

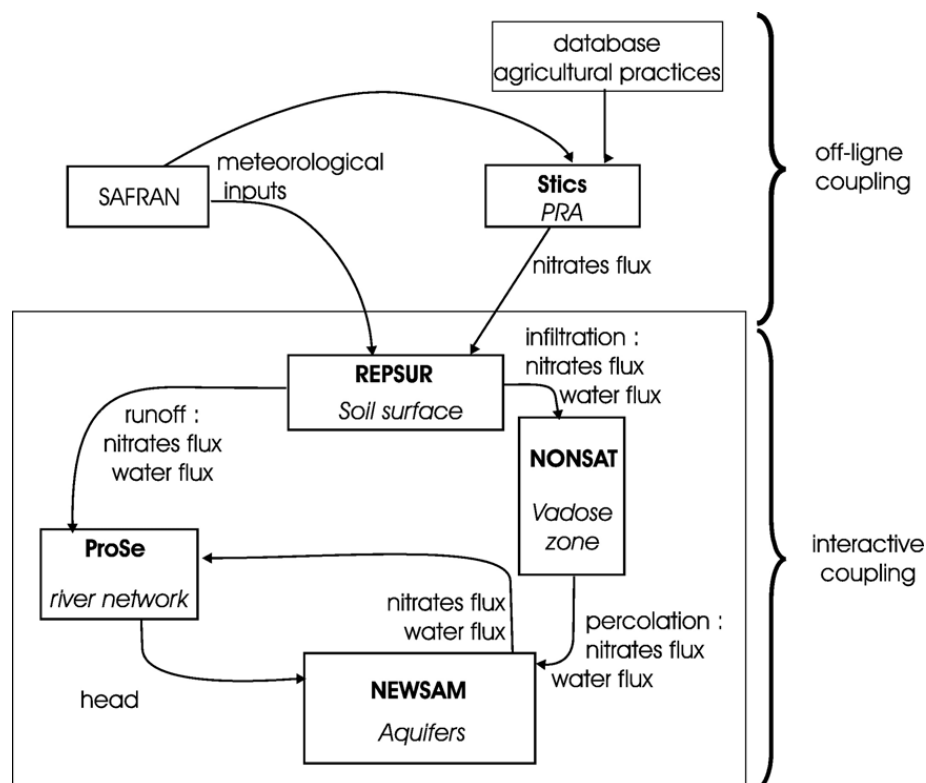


Fig. 2. Simplified scheme of CAWAQS.

770 km², located just before the confluence between the Aubetin and the Grand Morin, see Fig. 1 and Fig. 3) is 4 m³ s⁻¹. At the outlet of the basin, the mean annual discharge, calculated between 1971 and 2001, is 8 m³ s⁻¹, which corresponds to a mean net gain of 7 L s⁻¹ km⁻². The river network of this basin consists in 167 streams, with Strahler orders ranging between 1 and 5. Soil surface elevation ranges from 40 m to 240 m. The slopes of the river network range from 0.1% to 5.2%. The network drains two main geological formations: the Oligocene (see Rupelian limestone, Fig. 1) and the Eocene (From Priabonian to Ypresian clays, Fig. 1). These two aquifer units are separated by a clayey aquitard. In the valleys, the Grand Morin drains a thin alluvial aquifer (no more than 3–4 m deep in the last 40 km of the Grand Morin and always less than 1 km-wide). This alluvial aquifer acts as a filter between the Eocene formation and the Grand Morin River. The lower stream orders mainly drain the Oligocene formation and are located on the plateaux.

2.2. The CAWAQS tool

CAWAQS (Flipo, 2005; Flipo et al., 2005, in press), is a fully distributed tool, which results from the coupling of a fluvial hydrodynamic and biogeochemical model, PROSE (Even et al., 1998, 2004, 2007-this volume; Flipo et al., 2004), with a quasi-3D hydrogeological model NEWSAM (Ledoux et al., 1984). CAWAQS is coupled with

the agronomic model, STICS (Brisson et al., 1998), in order to simulate nitrate migration in each component of the basin (Fig. 2): i) root zone, ii) unsaturated zone, iii) aquifers and iv) rivers. The model is run with a daily time step in this study.

The modeling approach divides the surface of the soil into elementary sub-basins, which are defined by the contributing areas for each specific reach of river. Within a time step, runoff is transferred directly to the river, while the remaining water infiltrates through the unsaturated zone towards the aquifer system given a conceptual reservoir cascade. Aquifer system and river are both divided into elements (1D for the river and 2D for each aquifer layer). Flow through these two components of the hydrosystem is modeled using a fully distributed physically based approach. Nitrate flux leaving the root zone is calculated by STICS. This flux is split between runoff and infiltration using the hydric fluxes estimated with a conceptual model and under the assumption that they both have the same concentration. For a full description of how CAWAQS transfers water and nitrate fluxes through the entire hydrosystem, refer to Flipo (2005), Flipo et al. (in press).

2.3. Nitrate mass balance

The estimation of nitrate mass balance at the Grand Morin scale is based on previous works: (i) calibration

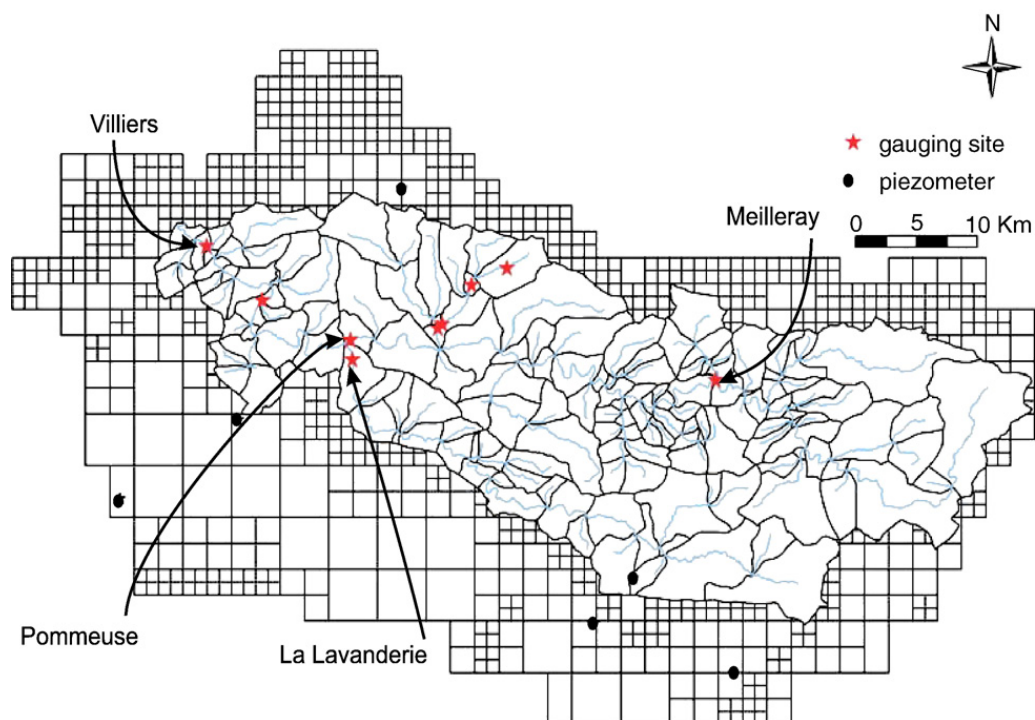


Fig. 3. Sampling station for discharge and piezometer for aquifers. Control stations for nitrate concentration are indicated by arrows.

and validation of the hydrological part of CAWAQS (Flipo, 2005; Flipo et al., 2005) (ii) nitrate transfer in the aquifer system and the resulting concentration field (Flipo, 2005; Flipo et al., in press). Given these ground-works, CAWAQS is capable of simulating in-stream nitrate concentrations.

Intensive sampling campaigns were achieved by the Compagnie Générale des Eaux (CGE) at four stations in the Grand Morin basin (Fig. 3) between 1991 and 1996. The four stations and their corresponding drainage area are from upstream to downstream : La Lavanderie (250 km²), Meilleray (330 km²), Pommeuse (770 km²) and Villiers (1150 km²). At each station, around 250 samples are available for the 5 year-sampling period. The missing nitrate concentrations and discharges are estimated to calculate an observed nitrate flux at each gauging station. Daily missing concentrations are assessed using the last available data. If the observed discharge is missing or questionable, the simulated discharge is used as an estimate.

Nitrate concentration in aquifers results from the transfer of nitrate from the soil to groundwater. Because the concentrations in aquifer estimated by CAWAQS agree with observations (Flipo, 2005; Flipo et al., in press), we

assume that CAWAQS is able to estimate nitrate losses at the catchment scale. Nitrate losses at the basin scale are estimated by the differences between observed and simulated nitrate fluxes in river.

3. Results

3.1. Observed and simulated nitrate concentrations in stream

Fig. 4 presents the comparison of the observed and simulated nitrate concentrations at the four gauging stations of the CGE, between May 1, 1991 and April 5, 1996. The three stations of Meilleray, Pommeuse and Villiers present similar observed concentrations during low flow. In 1991, these concentrations are about 5.4 mg N L⁻¹. They reach 6.3 mg N L⁻¹ in 1996. At La Lavanderie, the temporal evolution of the observed concentrations is more variable. The nitrate concentrations decrease the second year. The year 1992, which was dry, follows two other dry years. At La Lavanderie the concentrations decrease the second year of measurements. This might be due to the aquifer drying-out and thereby decreasing base-flow to the river. This

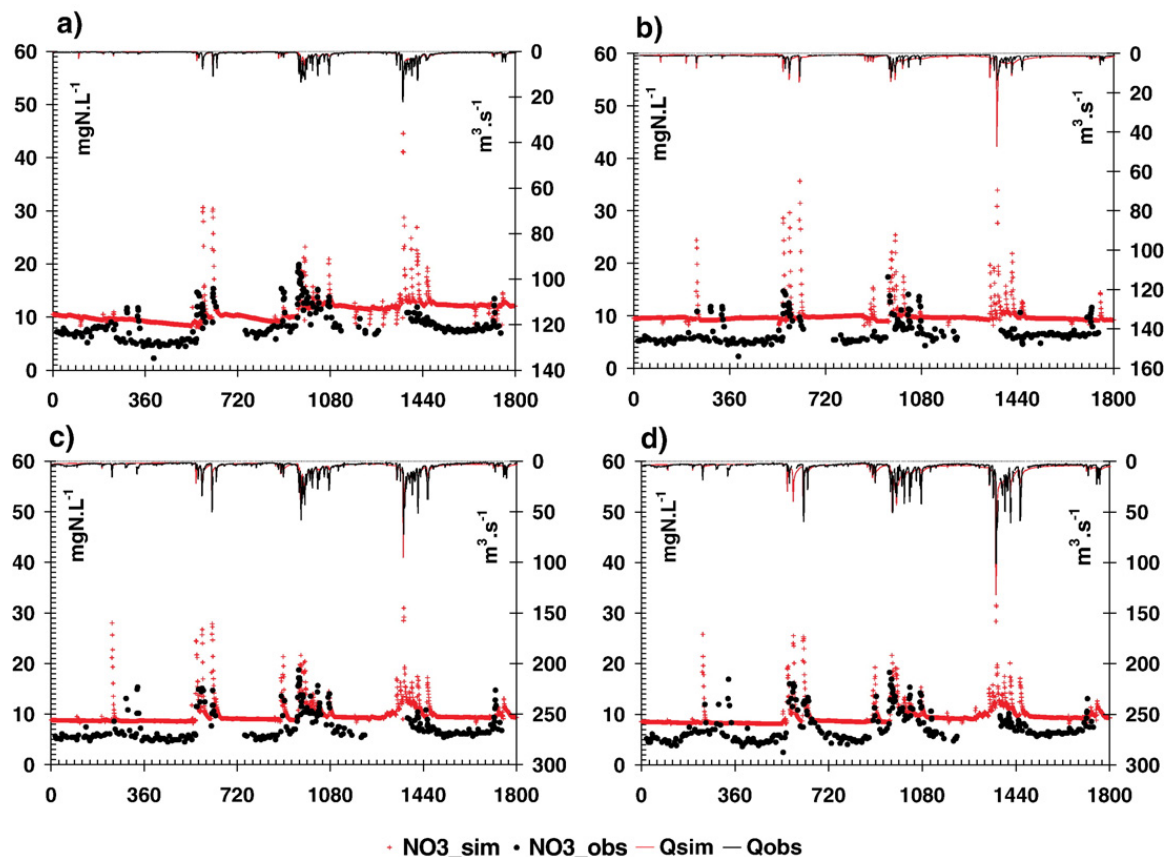


Fig. 4. Simulated and observed concentrations at a) La Lavanderie (250 km²), b) Meilleray (330 km²), c) Pommeuse (770 km²), d) Villiers (1150 km²). Period: May 1, 1991–April 5 1996.

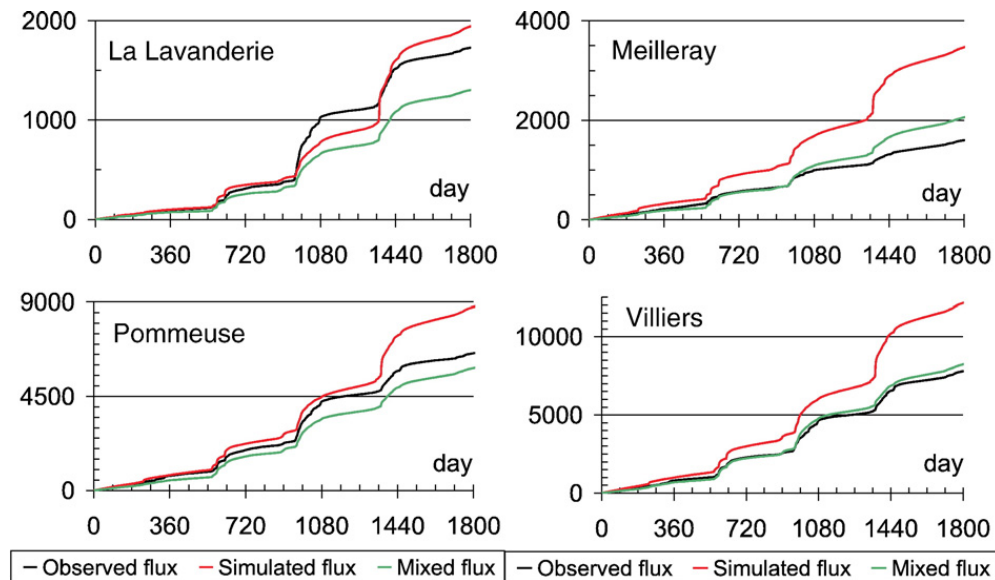


Fig. 5. Simulated and observed cumulated fluxes at the four gauging stations (tN). Period: May 1, 1991–April 5 1996. The ‘mixed’ flux corresponds to the simulated concentrations multiplied by the observed discharge.

assumption is suggested by the discharge decrease observed at La Lavanderie.

CAWAQS simulates concentrations in river higher than the observations. Since CAWAQS simulated nitrate concentrations in aquifers are realistic, the concentration discrepancies correspond to nitrate losses occurring during water transfer within the whole basin: aquifer system, alluvial plains and rivers. At low flow, the concentration dynamics simulated by CAWAQS corresponds to the observed one. At low flow, the increasing rate of the simulated concentrations seems consistent with the observations. For each gauging stations of the Grand Morin, the observed increase is about $0.9 \text{ mg N L}^{-1} \text{ yr}^{-1}$. At Pommeuse and Villiers, CAWAQS simulates an increase of $0.7 \text{ mg N L}^{-1} \text{ yr}^{-1}$. At Meilleray, the model does not properly reproduce the nitrate increase for the last year of simulation. As far as La Lavanderie is concerned, the dynamics simulated by CAWAQS are consistent with the observations.

The comparison of the observed and simulated concentrations indicates losses at low flow of about 3.4 mg N L^{-1} for the three stations located on the Grand Morin (Fig. 4b, c and d). The differences between observations and simulations at La Lavanderie display more variations. The losses at low flow are estimated to 4.5 mg N L^{-1} (Fig. 4a).

3.2. Nitrate losses estimation

The Fig. 5 presents the observed and simulated cumulative fluxes (period 1991–1996). The curve ‘mixed’ flux corresponds to the observed concentrations multi-

plied by the simulated discharges. Comparing the ‘mixed’ and the observed flux gives an estimate of the error in simulated nitrates flux due to the error in simulated discharges; this error is hence for the following referred to as the hydrological bias. The ‘corrected’ flux corresponds to the simulated flux corrected by the hydrological bias.

The hydrological model over-estimates the Grand Morin upstream flows at the station of Meilleray (+25%). On the other hand it underestimates them in Pommeuse (–10%). Finally in Villiers, observed and mixed nitrate fluxes are in agreement, with a slight over-estimate of 5%. Nitrate losses (Table 1) are assessed using either observations and simulation results, or observations and ‘corrected’ fluxes. The direct use of the simulation results leads to a very heterogeneous estimate of nitrate loss. But the nitrate losses appear to be homogeneous when correcting the simulation results by the hydrological bias, which indicates that the heterogeneous losses derived using the raw simulation results are mainly due to the model hydrological bias.

In the rest of this paper, we assume that the comparison of the ‘corrected’ flux with the observed flux is more efficient to estimate nitrate loss at the catchment scale than the comparison between raw simulated and observed fluxes. This assumption could be investigated in more detail with a sensitivity analysis and by calculating confidence intervals for the model input data. However an error in the timing of the hydrological fluxes (runoff or aquifer contribution to river flow) could lead to significant error in the river flux even if concentrations are estimated accurately in

Table 1
Nitrate fluxes in stream and denitrification rate estimates

	Characteristics		Flux (tN yr ⁻¹)					Denitrification (tN yr ⁻¹)		
	S	Q _o	Φ _o	Φ _m	Φ _s	Φ _c	Φ _s - Φ _o	$\frac{\Phi_s - \Phi_o}{\Phi_s}$	Φ _c - Φ _o	$\frac{\Phi_c - \Phi_o}{\Phi_c}$
Lavanderie	250	1.09	336	254	380	502	44	0.12	167	0.33
Meilleray	330	1.45	319	408	682	533	363	0.53	214	0.4
Pommeuse	770	4.92	1280	1152	1720	1912	440	0.26	632	0.33
Villiers	1150	5.86	1535	1626	2382	2249	846	0.36	714	0.32

S: surface in km²; Q_o: observed discharge in m³ s⁻¹; o: observed; s: simulated; m: “mixed”; c: simulated values corrected by the hydrological bias. May 1, 1991 to April 5, 1996.

aquifers. Although the assumption is likely to introduce mass balance errors, the slower flow velocities in the aquifer result in a more stable concentration field relative to the stream flow. In this case the “mixed” flux gives an estimate of the hydrological bias which seems relevant to take into account when assessing nitrate losses.

Using “corrected” and observed fluxes, nitrate losses correspond to one third of the nitrogen flux simulated by passive transport at each station. Only at Meilleray are the losses higher, equal to 40% of total in-stream nitrate flux. These higher losses could be explained by an overestimate of the infiltrated fluxes. It can also result from the presence of wetlands in the upstream part of the Grand Morin basin, which act as nitrogen sinks.

The outlet of the basin is located 5 km downstream from Villiers. Nitrate losses are estimated at 33% of the simulated in-stream nitrate flux (2000 kg N km⁻²

yr⁻¹), equal to 670 kg N km⁻² yr⁻¹, which represents 20% of the nitrate flux leaving the root zones (3360 kg N km⁻² yr⁻¹).

3.3. Nitrate mass balance at the basin scale

Having the simulation results for nitrate concentration in infiltrating water, runoff, groundwater, and exported flux at the outlet of the basin, it is possible to determine a mean annual mass balance over the period of 1991–1996 (Fig. 6). Results of Fig. 6 are given per year and are divided by the Grand Morin basin area (1200 km²) to provide flux per unit area. On average the nitrate flux leaving the root zone (3360 kg N km⁻² yr⁻¹) is removed from the system via the river network (1360 kg N km⁻² yr⁻¹, which corresponds to 40% of the infiltration flux), and stored in the aquifers (1330 kg N km⁻² yr⁻¹, which corresponds to 40% of the

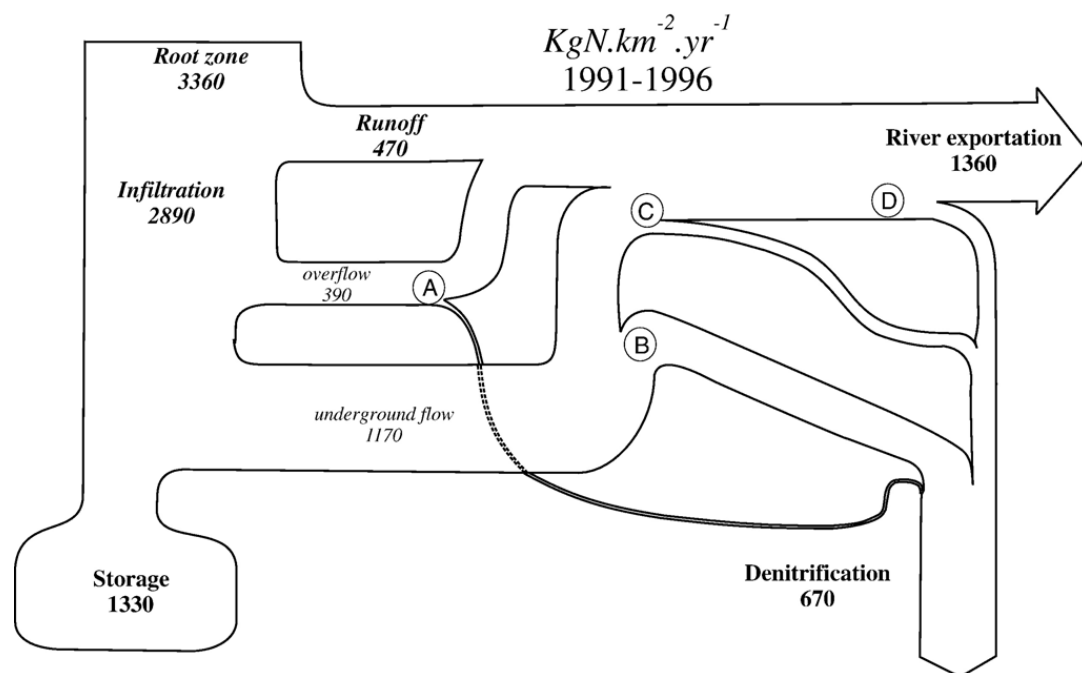


Fig. 6. Mean nitrate fluxes in kg N km⁻² yr⁻¹ from May 1, 1991 to April 5, 1996. A: wetlands denitrification; B: denitrification in alluvial plain; C: denitrification within hyporheic zones; D: denitrification in river by diffusion from the water column towards benthic compartments.

infiltration flux). Nitrate losses correspond to 20% of the infiltration flux ($670 \text{ kg N km}^{-2} \text{ yr}^{-1}$). The overflow component of Fig. 6 corresponds to seepage. Contribution of seepage to in-stream flux is important and consistent with the fact that soils of the Oligocene formation are usually saturated during the winter.

4. Discussion

4.1. Surface runoff

During precipitation events, the model simulates large in-stream nitrate concentration values that are generally higher than the observed concentrations. To analyze the discrepancies between observations and simulations, one can start by subtracting the discrepancies between simulations and observations at low flow, that is to say subtracting 1.1 mg N L^{-1} to the simulated concentrations (the simulated low flow values are about 4.5 mg N L^{-1} , while the observed ones are about 3.4 mg N L^{-1}). In spite of this correction, the model simulates concentrations greater than those observed. Despite the relatively sparse sampling interval that might miss several concentration peaks, the coupling between STICS and REPSUR should lead to over-estimated nitrate concentrations in runoff. This is because the coupling assumes that the nitrate concentration of runoff water is equal to that of root zone water. The surface module of CWAQs should be improved to better assess nitrate concentration in runoff water.

First the source term of nitrate has to be defined more accurately. As earlier work suggests, it is of crucial importance to assume nitrate to be a conservative tracer during storm events (Durand and Torres, 1996). Definition of this source term remains difficult because there is no clear correlation between nitrate concentrations and runoff (Moldan and Wright, 1998). However, Soulsby et al. (2003) indicate that nitrate concentrations tend to decline during events due to source depletion, which is difficult to assess in a model. Another challenging issue might be to simulate microbe and primary producer uptakes from surface water as suggested by Moldan and Wright (1998).

4.2. Nitrate losses at the basin scale

Nitrate losses reach 20% of the infiltrating nitrate flux (Fig. 6). There is no significant dilution effect in the aquifers of the Grand Morin (Flipo, 2005; Flipo et al., in press) and there is no significant nitrate uptake due to primary producers growth in rivers (Flipo et al.,

2004). Thus the nitrate losses might be due to denitrification. The zones of potential denitrification of the diffuse contributions (wetlands, alluvial plain, the hyporheic zone and benthic compartments) are indicated on Fig. 6 but their respective contributions to denitrification are not quantified. Works of various PIREN SEINE teams are in progress to quantify the contribution of these zones to the denitrification processes. We will hereafter discuss the role of the different zones within the basin.

4.2.1. Denitrification within aquifers

Many authors report the existence of autotrophic or heterotrophic denitrification in aquifers (Frind et al., 1990; Kinzelbach et al., 1991; Korom, 1992; Kunkel et al., 2004; Molénat and Gascuel-Odoux, 2002; Postma et al., 1991; Puckett et al., 2002; Wriedt, 2004).

The $^{15}\text{N-NO}_3^-$ isotopic composition of infiltrating water and of groundwater was analyzed in the Grand Morin by Sebilo (2003). There are no significant differences between isotopic compositions of water in the soil and in the saturated zones, which reveals negligible denitrification rate in the aquifers of the Grand Morin. This conclusion is in agreement with the geological structure of the Grand Morin, which is mainly composed of limestones. There are no organic matter and pyrite within these layers (indicating no denitrification potential), which reinforce the isotopic observations and leads to the same conclusion: the absence of denitrification within the aquifers of the Grand Morin.

4.3. Denitrification in riparian zones

The nitrate export at Villiers is $1340 \text{ kg N km}^{-2} \text{ yr}^{-1}$. A comparative analysis of the observed concentrations between Villiers and Pommese indicates a concentration reduction (Fig. 4c and d). This reduction of about 0.2 mg N L^{-1} is related to the mixture of the Grand Morin water with the alluvial aquifer water, which is drained by the Grand Morin in this part of the basin. In 1996, the CGE carried out monthly measurements for two wells of the alluvial aquifer in this part of the basin. The mean nitrate concentrations were very low, ranging between 0.2 and 0.5 mg N L^{-1} . These measurements emphasize the strong denitrifying potential of the organic-rich alluvial aquifer in the downstream part of the Grand Morin. In this part of the basin, the Grand Morin also drains the deeper aquifer, where the nitrate concentrations are much lower than in the upstream part of the basin (Flipo, 2005; Flipo et al., in press).

The role of the riparian buffer is difficult to assess. Puckett (2004) gives a good outline of the difficulty in

characterizing the role of the riparian zone, where processes are difficult to identify separately, and pathways are not easy to determine. The purifying role of the riparian zone is often associated with that of the river. For instance Seitzinger et al. (2002) assume that all the denitrification occurs in-stream. Conversely, Billen and Garnier (1999) and Sebilo (2003) associate these two processes to the riparian denitrification. Using an isotopic approach and a simple model, Sebilo (2003) estimated that these two types of denitrification would contribute, on average to a loss of 30% of infiltrating flux in the Grand Morin basin for 1995, which is in agreement with the CAWAQS simulation.

4.3.1. In-stream denitrification

Whether or not in-stream nitrate removal processes are significant remains unclear for small stream orders. It seems that benthic processes are predominant, but it is difficult to assess where the denitrification takes place (within benthic layers as periphyton or at the surface-ground water interface within the hyporheic zone). Previous work concerning periphytic processes facilitated the development of a model of periphyton at the river scale (Flipo et al., 2004). Initial results indicate an important nitrification occurring within the biofilm. Based on this periphytic model and on all available data, the role of the periphyton on denitrification was investigated (Flipo, 2005). It seems to be that the denitrification by nitrate diffusion from the water column to the benthic layers is negligible. But these first numerical results need to be confirmed by more accurate investigations because the presence of an anoxic sediment layer under the benthic layers could lead to significant denitrification (Flipo et al., 2007-this volume).

4.3.2. Denitrification in the hyporheic zone

Groundwater and surface water interactions in the hyporheic zone can greatly influence nutrient processing in streams (Triska et al., 1989; Duff and Triska, 2000). Sheibley et al. (2003) have used an experimental approach to quantify nitrification and denitrification rates in the hyporheic zone, and found high denitrification rates, ranging between 53–160 mg N m⁻² d⁻¹. Sjodin et al. (1997) found time dependant denitrification rates ranging between 7 and 100 mg N m⁻² d⁻¹. Moreover, the role of the hyporheic zone could be important since it has been demonstrated that denitrification is greater by filtration through a porous media than by diffusion (Sebilo et al., 2003). From this point of view, it seems that the hyporheic zone might have a more significant impact in nitrate removal than river benthic layers do.

5. Conclusion

The high nitrate pollution of surface and groundwater in the Seine basin led the PIREN SEINE to consider the origin, the transfer, and the fate of nitrate within the whole Seine basin. To better understand the transfers and transformations of nitrogen in the natural environment, the present work focussed on a smaller scale. To carry out this project, a new modeling tool, CAWAQS, was built. CAWAQS results from the coupling of numerous tools and concepts used in the framework of the PIREN SEINE. STICS simulates nitrate fluxes leaving the root zone and NEWSAM and PROSe simulate the transfer of these fluxes in surface and groundwater, respectively.

Simulation results for the Grand Morin basin for the period 1991–1996 have shown that the nitrate flux leaving the roots zone (3360 kg N km⁻² yr⁻¹) is mainly exported by the rivers and stored in the aquifers, while 20% of the infiltration flux is removed by denitrification. Future challenges are to distinguish and quantify the role of each part of the basin in the nitrogen cycle, which requires a better understanding of the water pathways and an assessment of the uncertainties within the model.

The model is of interest as far as alluvial plain and wetlands studies are concerned. Currently, many studies are in progress to locate the potential sites of denitrification starting from various indexes (Mérot et al., 2003). A functional typology of the wetlands in the Seine basin was carried out by Gaillard et al. (2002). Work is currently underway to connect the various levels of this typology with topographic and climato-topographic indexes. To explore the denitrifying capacities of the alluvial wetlands, it will be necessary to operate the synthesis of more information. CAWAQS is adapted to do that since it is able to simulate nitrogen and water fluxes exchanged between the aquifer system and the river network. Nitrate mass balance assessment could thus be carried out to quantify the role of the alluvial wetlands in nitrate removal at the scale of the Grand Morin.

Acknowledgements

This work is a contribution to the PIREN SEINE research program on the Seine basin (<http://www.sisyph.jussieu.fr/internet/piren/>). We would like to take the opportunity to thank many institutions who provided data and information: AESN, AQUIBRIE, BRGM, CGE, CGG, CEMAGREF, DIREN IdF, INRA, METEO FRANCE. Patrick Gayet and especially Benjamin Mirus were kind enough to help with revising the English of this paper.

References

- Abbott M, Bathurst J, Cunge J, O'Connell P, Rasmussen J. An introduction to the European hydrological system. 1. History and philosophy of a physically based distributed modelling system. *J Hydrol* 1986a;87:45–59.
- Abbott M, Bathurst J, Cunge J, O'Connell P, Rasmussen J. An introduction to the European hydrological system. 2. Structure of a physically based distributed modelling system. *J Hydrol* 1986b;87:61–77.
- Arheimer B, Olsson J. Integration and coupling of hydrological models with water quality models: applications in Europe. Tech. rep., Workgroup report, WMO RA VI (K55.1.02); 2003.
- Beaujouan V, Durand P, Ruiz L. Modelling the effect of the spatial distribution of agricultural practices on nitrogen fluxes in rural catchments. *Ecol Model* 2001;137:93–105.
- Benoît M, Bornerand C, Mignolet C, Bienaimé E, Cosserat-Mangeot R, Mari J-F, et al. Etude rétrospective des dynamiques agricoles dans le bassin de la Seine depuis les années 70. Tech. rep., PIREN SEINE; 2000.
- Beven K. Changing ideas in hydrology. The case of physically-based model. *J Hydrol* 1989;105:157–72.
- Billen G, Garnier J. Nitrogen transfers through the Seine drainage network: a budget based on the application of the RIVERSTRAHLER model. *Hydrobiologia* 1999;410:139–50.
- Billen G, Garnier J, Ficht A, Cun C. Ecological modeling of the 50 last years of anthropogenic impact in the seine estuary. *Estuaries* 2001;24(6):977–93.
- Billen G, Garnier J, Rousseau V. Nutrient fluxes and water quality in the drainage network of the Scheldt basin over the last 50 year. *Hydrobiologia* 2005;540(1–3):47–67.
- Boët P, Belliard J, dit Thomas RB, Tales E. Multiple human impacts by city of paris on fish communities in the Seine river basin, France. *Hydrobiologia* 1999;410:59–68.
- Boyer E, Goodale C, Jaworski N, Howarth R. Anthropogenic nitrogen sources and relationships to riverine nitrogen export in the northeastern U.S.A. *Biogeochemistry* 2002;57/58:137–69.
- Brisson N, Mary B, Ripoche D, Jeuffroy M, Ruget F, Nicoulaud B, et al. STICS: a generic model for the simulation of crops and their water and nitrogen balances. 1 — Theory and parameterization applied to wheat and corn. *Agronomie* 1998;18:311–46.
- Brunstein, D., 1999. Un Système d'Information Géographique pour l'analyse du continuum amont-aval et les changements d'échelle dans un système fluvial. Ph.D. thesis, Université de Paris I – Panthéon – Sorbonne.
- Cinnirella S, Buttafuoco G, Pirrone N. Stochastic analysis to assess the spatial distribution of groundwater nitrate concentrations in the Po catchment. *Environ Pollut* 2005;133:569–80.
- de Wit M, Bendoricchio G. Nutrient fluxes in the Po basin. *Sci Total Environ* 2001;273:147–61.
- Diekkrüger B, Söndgerath D, Kersebaum K, McVoy C. Validity of agroecosystem models. A comparison of results of different models applied to the same data set. *Ecol Model* 1995;81:3–29.
- Duff J, Triska F. Nitrogen biogeochemistry and surface–subsurface exchange in streams. In: Jones J, Mulholland P, editors. *Streams and groundwaters*. Academic; 2000. p. 197–220.
- Durand P, Torres JJ. Solute transfer in agricultural catchments: the interest and limits of mixing models. *J Hydrol* 1996;181:1–22.
- Even S, Poulin M, Garnier J, Billen G, Servais P, Chesterikoff A, et al. River ecosystem modelling. Applications of the PROSE model to the Seine river (France). *Hydrobiologia* 1998;373/374: 27–45.
- Even S, Poulin M, Mouchel J-M, Seidl M, Servais P. Modelling oxygen deficits in the Seine river downstream of combined sewer overflows. *Ecol Model* 2004;173:177–96.
- Even S, Bacq N, Ruelland D, Billen G, Garnier J, Poulin M, Théry S, Blanc S. New tools for managing water resources at the regional scale : implementation of the European Framework Directive on the Seine River Basin. *Sci Total Environ* 2007;375:274–91 (this volume).
- Ewen J, Parkin G, O'Connell P. SHETRAN: distributed river basin flow and transport modelling system. *J Hydrol Eng* 2000;5: 250–8.
- Fazal M, Imaizumi M, Ishida S, Kawachi T, Tsuchihara T. Estimating groundwater recharge using the SMAR conceptual model calibrated by genetic algorithm. *J Hydrol* 2005;303:56–78.
- Flipo N, 2005. Modélisation intégrée des transferts d'azote dans les aquifères et les rivières : Application au bassin du Grand Morin. Ph.D. thesis, Centre d'Informatique Géologique, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Flipo N, Even S, Poulin M, Tusseau-Vuillemin M-H, Améziane T, Dauta A. Biogeochemical modelling at the river scale: plankton and periphyton dynamics — Grand Morin case study, France. *Ecol Model* 2004;176:333–47.
- Flipo N, Even S, Poulin M, Ledoux E. Hydrological part of CAWAQS (Catchment Water Quality Simulator): fitting on a small sedimentary basin. *Verh Internat Verein Limnol* 2005;29(2):768–72.
- Flipo, N., Jeannée, N., Poulin, M., Even, S., Ledoux, E., in press. Assessment of the nitrate pollution in aquifers : simultaneous use of the kriging and of the physically-based model CAWAQS. *Environ Pollut*.
- Flipo N, Rabouille C, Poulin M, Even S, Tusseau-Vuillemin M, Lalande M. Primary production in headwater streams of the Seine basin: the Grand Morin case study. *Sci Total Environ* 2007;375:98–109 (this volume).
- Frind E, Duynisveld W, Strebel O, Boettcher J. Modelling of multicomponent transport with microbial transformation in groundwater: the Fuhrberg case. *Water Resour Res* 1990;26(8): 1707–19.
- Gaillard S, Sebilo M, Brunstein D, N'Guyen-The D, Grably M, Fustec E, et al. Typologie et fonctions des zones humides riveraines. Tech. rep., PIREN SEINE; 2002.
- Garnier J, Billen G, Coste M. Seasonal succession of diatoms and chlorophyceae in the drainage network of the river Seine: observations and modelling. *Limnol Oceanogr* 1995;40(4):750–65.
- Garnier J, Billen G, Hanset P, Testard P, Coste M. Développement algal et eutrophisation dans le réseau hydrographique de la Seine. In: Meybeck M, de Marsily G, Fustec E, editors. *La Seine en son bassin—Fonctionnement écologique d'un système fluvial anthropisé*. Elsevier; 1998. p. 593–626.
- Garnier J, Némery J, Billen G, Théry S. Nutrient dynamics and control of eutrophication in the Marne river system: modelling the role of exchangeable phosphorus. *J Hydrol* 2005;304:397–412.
- Gomez E, Ledoux E, Viennot P, Mignolet C, Benoît M, Bornerand C, et al. Un outil de modélisation intégrée du transfert des nitrates sur un système hydrologique: application au bassin de la Seine. *La Houille Blanche* 2003;3-2003:38–45.
- Howarth R, Billen G, Swaney D, Townsend A, Jaworski N, Lajtha K, et al. Regional nitrogen budgets and riverine N and P fluxes for the drainages to the North Atlantic Ocean: natural and human influences. *Biogeochemistry* 1996;35:75–139.
- ISMAP. Synthèse des travaux des partenaires français. Rapport final. Tech. rep., projet EUREKA EU 479; 1997.
- Jarvie H, Neal C, Withers P, Wescott C, Acornley R. Nutrient hydrochemistry for a groundwater-dominated catchment: the Hampshire Avon, UK. *Sci Total Environ* 2005;344:143–58.

- Joosten L, Buijze S, Jansen D. Nitrate in sources of drinking water? Dutch drinking water companies aim at prevention. *Environ Pollut* 1998;102:487–92.
- Kauark-Leite, L., 1990. Réflexions sur l'utilité des modèles mathématiques dans la gestion de la pollution diffuse d'origine agricole. Ph.D. thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- Kinzelbach W, Schäfer W, Herzer J. Numerical modeling of natural and enhanced denitrification processes in aquifers. *Water Resour Res* 1991;27(6):1123–35.
- Korom S. Natural denitrification in the saturated zone: a review. *Water Resour Res* 1992;28(6):1657–68.
- Kunkel R, Bach M, Behrendt H, Wendland F. Groundwater-borne nitrate intakes into surface waters in Germany. *Water Sci Technol* 2004;49(3):11–9.
- Lasserre F, Razack M, Banton O. A GIS-linked model for the assessment of nitrate contamination in groundwater. *J Hydrol* 1999;224(3–4):81–90.
- Ledoux E, Girard G, Villeneuve J. Proposition d'un modèle couplé pour la simulation conjointe des écoulements de surface et des écoulements souterrains sur un bassin hydrologique. *La Houille Blanche* 1984;1–2:101–10.
- Lunn R, Adams R, Mackay R, Dunn S. Development and application of a nitrogen modelling system for large catchments. *J Hydrol* 1996;174:285–304.
- McLay C, Dragten R, Sparling G, Selvarajah N. Predicting groundwater nitrate concentrations in a region of mixed agricultural land use: a comparison of three approaches. *Environ Pollut* 2001;115:191–204.
- Mérot P, Squidant H, Auroousseau P, Hefting M, Burt T, Maitre V, et al. Testing a climato-topographic index for predicting wetlands distribution along a European climate gradient. *Ecol Model* 2003;163:51–71.
- Mignolet C, Schott C, Benoît M. Spatial dynamics of agricultural practices on a basin territory: a retrospective study to implement models simulating nitrate flow. The case of the Seine basin. *Agronomie* 2004;24:219–36.
- Moldan F, Wright R. Episodic behaviour of nitrate in runoff during six years of nitrogen addition to the NITREX catchment at Gardsjön, Sweden. *Environ Pollut* 1998;102(S1):439–44.
- Molénat J, Gascuel-Oudoux C. Modelling flow and nitrate transport in groundwater for the prediction of water travel times and of consequences of land use on water quality. *Hydrol Process* 2002;16:479–92.
- Moxey A, White B. NELUP: some reflections on undertaking and reporting interdisciplinary river catchment modelling. *J Environ Plan Manag* 1998;41:397–402.
- Penven M, Muxart T, Guerrini M-C, Jannot P, Brunstein D, Mussot R. La Seine en son bassin. Fonctionnement écologique d'un système fluvial anthropisé. Ch. Un bassin versant agricole et ses pratiques: le Grand Morin. Elsevier; 1998. p. 127–58.
- Postma D, Boesen C, Kristiansen H, Larsen F. Nitrate reduction in an unconfined sandy aquifer: water chemistry, reduction processes, and geochemical modeling. *Water Resour Res* 1991;27(8):2027–45.
- Poulin M, Flipo N, Even S, Tusseau-Vuillemin M-H, Sainte-Laudy M, Goulette S, et al. Site atelier du Grand Morin. Tech. rep., PIREN Seine; 2002.
- Puckett L. Hydrogeologic controls on the transport and fate of nitrate in ground water beneath riparian buffer zones: results from thirteen studies across the United States. *Water Sci Technol* 2004;49(3):47–53.
- Puckett L, Cowdery T, McMahon P, Tornes L, Stoner J. Using chemical, hydrologic, and age dating analysis to delineate redox processes and flow paths in the riparian zone of a glacial outwash aquifer-stream system. *Water Resour Res* 2002;38(8). doi:10.1029/2001WR000396.
- Refsgaard J, Sorensen H, Mucha I, Rodak D, Hlavaty Z, Bansky L, et al. An integrated model for the danubian lowland — methodology and applications. *Water Resour Res* 1998;12:433–65.
- Refsgaard J, Thorsen M, Jensen J, Kleetschulte S, Hansen S. Large scale modelling of groundwater contamination from nitrate leaching. *J Hydrol* 1999;221:117–40.
- Sebilo M., 2003. Utilisation du traçage isotopique naturel pour caractériser et quantifier les processus de nitrification et de dénitrification à l'échelle du réseau hydrographique de la Seine. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie— Paris VI.
- Sebilo M, Billen G, Grably M, Mariotti A. Isotopic composition of nitrate–nitrogen as a marker of riparian and benthic denitrification at the scale of the whole Seine river system. *Biogeochemistry* 2003;63:35–51.
- Seitzinger S, Styles R, Boyer E, Alexander R, Billen G, Howarth R, et al. Nitrogen retention in rivers: model development and application to watersheds in the northeastern U.S.A. *Biogeochemistry* 2002;57/58:199–237.
- Sheibley R, Duff J, Jackman A, Triska F. Inorganic nitrogen transformations in the bed of the Shingobee River, Minnesota: integrating hydrologic and biological processes using sediment perfusion cores. *Limnol Oceanogr* 2003;48(3):1129–40.
- Sjodin A, Lewis W, Saunders J. Denitrification as a component of the nitrogen budget for a large plains river. *Biogeochemistry* 1997;39:327–42.
- Soulsby C, Petry J, Brewer M, Dunn S, Ott B, Malcolm I. Identifying and assessing uncertainty in hydrological pathways: a novel approach to end member mixing in a Scottish agricultural catchment. *J Hydrol* 2003;274:109–28.
- Spalding R, Exner M. Occurrence of nitrate in groundwater — a review. *J Environ Qual* 1993;22:392–402.
- Triska F, Kennedy V, Avanzino R, Zellweger G, Bencala K. Retention and transport of nutrients in a third-order stream in northwestern California: channel processes. *Ecology* 1989;70:1877–92.
- Van Breemen N, Boyer E, Goodale C, Jaworski N, Paustian K, Seitzinger S, et al. Where did all the nitrogen go? Fate of nitrogen inputs to large watersheds in the northeastern U.S.A. *Biogeochemistry* 2002;57/58:267–93.
- Vinten A, Dunn S. Assessing the effects of land use on temporal change in well water quality in a designated nitrate vulnerable zone. *Sci Total Environ* 2001;265:253–68.
- Wriedt G., 2004. Modelling of nitrogen transport and turnover during soil and groundwater passage in a small lowland catchment of northern Germany. Ph.D. thesis, Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH, Universität Postdam.
- Wriedt G, Spindler J, Geistlinger H, Rode M. Modelling the fate of nitrate in lowland catchment system. In: Heathwaite L, Webb B, Rosenberry D, Weaver D, Hayash M, editors. Dynamics and Biogeochemistry of river corridors and wetlands, vol. 294. IAHS Publ; 2005. p. 46–54.

- D.5** [Polus et al. \(2011\)](#) Geostatistics for assessing the efficiency of distributed physically-based water quality model. Application to nitrates in the Seine River. *Hydrological Processes* 25(2), 217–233

Geostatistics for assessing the efficiency of a distributed physically-based water quality model: application to nitrate in the Seine River

Edwige Polus,* Nicolas Flipo, Chantal de Fouquet and Michel Poulin

MINES ParisTech, Centre de Geosciences, 35 rue Saint-Honoré, F-77305 Fontainebleau, France

Abstract:

This article shows how geostatistics can be used to reduce distributed physically based model (DPBM) uncertainties when assessing nitrate concentrations along a 250-km stretch of the Seine River. First of all, co-kriging is used to build a set of boundary conditions (BCs) (inlet concentrations from major tributary rivers) consistent with validation data. It partially addresses the issues of errors in data used as model input and errors in data to be compared with model outputs. Then the analysis of temporal variograms (simple variograms of observed and simulated concentrations, and their cross-variogram) reveals a clear mismatch between simulated and observed values that was not detected by classical objective functions [root mean squared error (RMSE), etc.]. Variograms appear to include three components representing three different time scales: sub-weekly, monthly and annual scales. Mismatches between simulated and observed values are analysed as (i) wrong quantification of inputs to the river (especially during the rainy period: combined sewer overflow (CSO), waste water treatment plant (WWTP) and tributary contributions to the nitrate fluxes in the Seine River) and (ii) wrong description of physical processes within the river. Finally, the modelling of simple and cross-variograms appears to be a sensitive analysis tool which can be used to describe and reduce modelling uncertainties. Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

KEY WORDS river water quality; distributed physically based model; geostatistics; variogram; cross-variogram; uncertainty; validation; nitrate

Received 18 December 2009; Accepted 13 July 2010

INTRODUCTION

The quantitative modelling of in-stream water quality began with a simple conceptual model (Streeter and Phelps, 1925), which was based on oxygen. After this initial step, carbon cycle and then nutrients were added, leading to modern water quality models (Barnwell *et al.*, 1987; Brown and Barnwell, 1987; Ambrose *et al.*, 1988, 1996; Billen and Servais, 1989; Crabtree *et al.*, 1994; Reichert, 1994; Garnier *et al.*, 1995; Ivanov *et al.*, 1996; Even *et al.*, 1998, 2004; Wells, 2000; Wool, 2001). Contrary to the conceptual model by Streeter and Phelps (1925), the biogeochemical processes are nowadays physically based and the transport is based on hydraulic fluxes. Hydraulics can be physically based or conceptual. Reichert *et al.*, (2001b) and Arheimer and Olsson (2003) reviewed many of these models.

Even though all these models are more detailed, the distribution through space and the way in which phenomena are described fit a large number of parameters. If the model is based on physical (elementary) processes, some parameter values can be obtained through *in situ* or lab experiments and then physiological parameters are set to these values (Garnier *et al.*, 1995; Flipo *et al.*, 2007b). But modern biogeochemical models are so complex that

they remain difficult to fit and validate (Arhonditsis and Brett, 2004).

The main problem with validating a distributed physically based model (DPBM) is summarized by the equifinality concept (Beven, 1989). As stated by Ebel and Loague (2006) the equifinality is, in the most general sense, the case where quite different processes produce a similar effect. This is because very few measurements are available to mathematically close the system of equations that describes the behaviour of the system. As a consequence, not all unknowns can be identified. This has motivated authors to investigate uncertainty sources which are usually identified as being:

- errors in data used as model inputs;
- errors in validation data, compared with model outputs;
- uncertainties due to sub-optimal parameter values;
- uncertainties due to internal model variability.

These problems remain unsolved even today although many studies have been carried out, leading to interesting uncertainty assessment tools (Refsgaard, 1997; Anderton *et al.*, 2002a,b; Butts *et al.*, 2004). But, as stated by Beven (2006b): ‘there are different philosophies about how to estimate uncertainties and take into account input, measurement and model structural error. These will be difficult to resolve in the near future because we do not actually have the data to properly test the different methodologies’. Even worse, (Beven, 2006b)

* Correspondence to: Edwige Polus, MINES ParisTech, Centre de Geosciences, 35 rue Saint-Honoré, 77305 Fontainebleau, France.
E-mail: edwige.lefebvre@mines-paristech.fr

goes on with: 'it is simply not possible to evaluate the statistical characteristics of input data errors or parameter estimation errors'.

To summarize the issue in environmental sciences, on one hand, at the hydrological network scale, too few measurements are available to estimate all the variables of the system of equations and to identify all calibration parameters (those which are not easily measured). On the other hand, the system of equations is physically based, describing the behaviour of variables as best as possible. Instead of rejecting this formalism because of mathematical problems, we propose a new methodology for validating in-stream water quality models, based on observations: geostatistics is used to analyse the spatial and temporal behaviour of the observations and to compare the variability of the observations with that of the simulations. Three arguments motivate this approach.

First, the coupling between geostatistics and the process-based modelling was discussed by Fouquet (2006) and successfully applied by Flipo *et al.*, (2007a) to the case of nitrate contamination at the basin scale. It was also used by Casper and Vohland (2008), for assessing spatially distributed evaporation.

Then, combining geostatistics and process-based approaches is much more powerful than using a single objective function usually based on root mean squared error (RMSE) or Nash-Sutcliffe efficiency Nash and Sutcliffe, 1970 for hydrologists. Using only statistical criteria will conceal many spatial and time mismatches between simulations and observations. One classical way to assess model stability based on a single criterion is to make Monte Carlo simulations which have a high computer cost, especially when using a distributed process-based model. This limitation is even worse when using multiple criteria, but it is a valuable tool for identifying relevant model components (Guntner *et al.*, 1999). In the particular case of hydrology, although a multi-criteria approach can help to better understand what processes need to be further investigated, it is shown that

no part of the parameter space yields optimal simulations for all criteria (Anderton *et al.*, 2002a,b).

Finally, combining geostatistics and process-based approaches partially addresses the equifinality problem (Beven, 1993, 2006a,b) in that it directly compares the variabilities (and not the variables themselves) of observations and simulations. But it is clear that this technique does not address the *incommensurability* problem (Beven, 1989), which means that parameters and state variables at the grid points of the model often do not correspond to field-based estimates or observations Ebel and Loague, 2006). As discussed in this article, it also allows boundary condition (BC) issues to be identified and provides a framework where measurement errors and model errors can be addressed together through summarizing tools: temporal variograms of both observed and simulated data.

First, the site of interest (250 km in the downstream part of the Seine River) is briefly described. Then theoretical principles are summarized for a process-based modelling of river water quality, as well as geostatistical tools such as variogram and co-kriging. Afterwards a method based on multiple variogram analysis, aiming at assessing the consistency of process-based model outputs with regard to data, is presented and applied to nitrate transfer in the Seine River. Finally, the contribution of this work for reducing model uncertainties is summarized.

MODEL AND DATA OF THE DOWNSTREAM PART OF THE SEINE RIVER

Modelled Area: The Seine River

The studied domain consists in the 225-km stretch along the Seine River and the 36-km stretch along the Marne River. The length of the Seine River upstream of its confluence with the Marne River is approximately 14 km (Figure 1). The Seine and Marne upstream limits

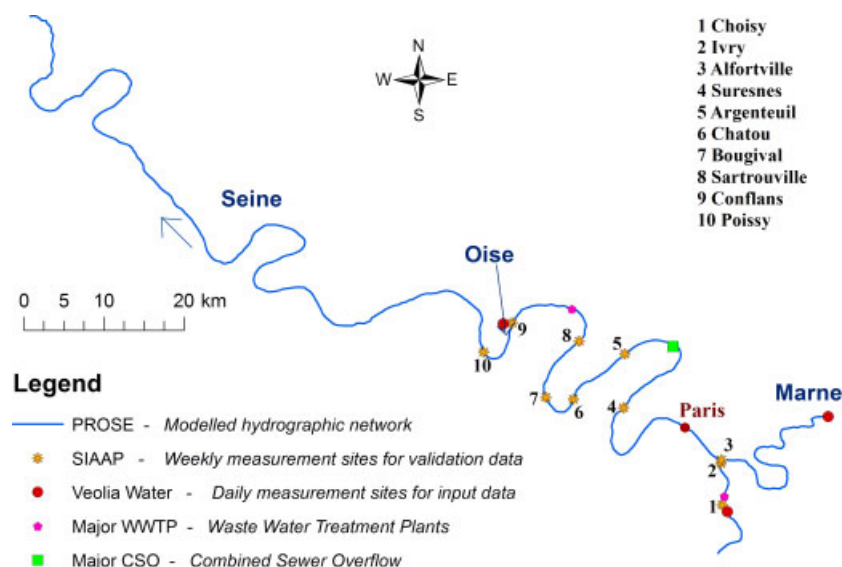


Figure 1. Modelled area and location of different measurement sites

are located approximately at the entrance of the Greater Paris, whereas the downstream limit is the entrance of the Seine estuary. Two waste water treatment plants (WWTPs), namely Seine Amont and Marne Aval, are located at the upstream limit of the Greater Paris, whereas the Seine Aval WWTP is located close to the downstream limit of the Greater Paris.

The Seine Amont WWTP treats the waste waters from 1 800 000 inhabitants. Its usual discharge is $7 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ and up to $17 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ during rainy periods. The Marne Aval WWTP treats the waste waters from 220 000 inhabitants. Its usual discharge is $0.9 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. Seine Aval WWTP treats the waste waters from 5 000 000 inhabitants. Its usual discharge is $20 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ and up to $50 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ during rainy periods. In order to characterize dilution, these WWTP discharge values have to be compared with the Seine discharge in Paris city and at the output of the Seine River when it reaches the Seine estuary. The Seine River mean discharge in Paris is $280 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, decreasing to $60 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ in summer with a 5-year return period. At the entrance of the estuary, the Seine River mean discharge is $540 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ decreasing to $180 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ in summer with a 5-year return period.

The total length of the Seine River in this large urban area is approximately 80 km. Recently, the PROSE model was used to simulate the water quality for the 2003–2008 period. This study focuses on the year 2003, and on nitrate.

The PROSE model

The PROSE model (Even *et al.*, 1998, 2004; Flipo *et al.*, 2004) is composed of three modules (Figure 2a): hydrodynamic, transport and biogeochemical modules.

The hydrodynamic module is based upon a longitudinal 1D form of the Saint-Venant equations, solved by the finite difference method. The transport module simulates

the advection and dispersion of conservative and reactive substances, both particulate and dissolved.

The biogeochemical model is an adaptation of the RIVE model (Billen *et al.*, 1994; Garnier *et al.*, 1995) (Figure 2b); it is described in Appendix A. For modelling purposes, the river is divided into three compartments (Figure 2a): the water column, the sediments and the periphyton, integrating both the epilithon and the epipelon. The water column can, through sedimentation, erosion, permanent losses and scouring, exchange suspended matter with sediment and periphytic layers (Flipo *et al.*, 2004). Two compartments were simulated (water column and sediments) because biogeochemical reactions due to periphyton are less important in large rivers than in head-water streams (Flipo *et al.*, 2004, 2007b).

As the aim of this study is to simulate nitrate concentrations in the water column, we focus only on processes affecting the nitrogen concentration hereafter. PROSE outputs are instantaneous values of local nitrate concentrations at each cell center.

Model calibration and validation. The conceptual scheme of RIVE is based on a macroscale simulation of the micro-organism dynamics that govern the transformation of many constituents (organic matter, nutrients and oxygen). The main idea is that the biological processes are always the same but stimulated differently according to different environmental conditions, which leads to different states of the hydrosystem (Reichert *et al.*, 2001b,c; Billen *et al.*, 2005). The main part of the physiological parameters of primary producers (PPs) and bacteria has been determined experimentally on natural assemblages of phytoplankton or bacterioplankton (Billen *et al.*, 1990b; Garnier *et al.*, 1995, 1998), or based on a literature review or fitted by trial-errors in previous studies (Garnier *et al.*, 1995, 2000; Even *et al.*, 1998, 2004;

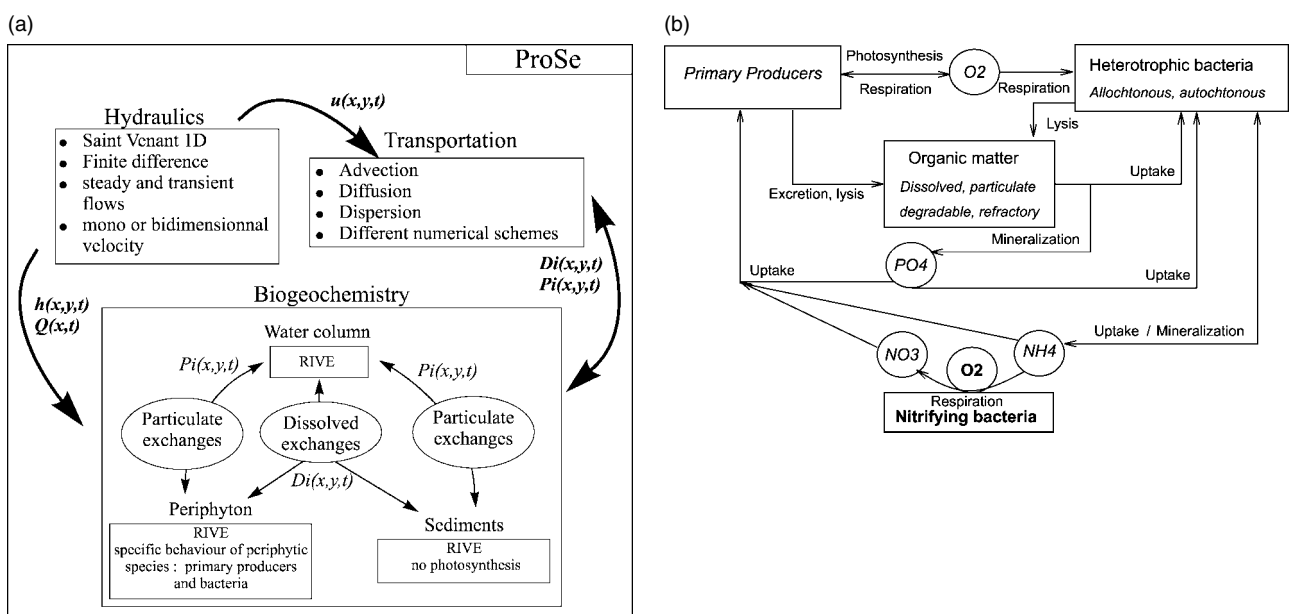


Figure 2. (a) Simplified scheme of the PROSE model. h is the water depth, u the velocity, Q the discharge, Di and Pi are dissolved and particulate phases of the i -species. (b) Simplified scheme of the RIVE model. Carbon, oxygen and nutrient cycles are represented

Flipo *et al.*, 2004). Hydrodynamical and transport parameters have also been fitted by trial-errors for ProSE (Even *et al.*, 1998, 2004) or for other models (Billen *et al.*, 1994; Garnier *et al.*, 1995; Garnier, 2000). Then the RIVE model has been successfully applied to many rivers of the Seine basin (Garnier *et al.*, 1995, 2005; Billen *et al.*, 1998b, 2001; Even *et al.*, 1998, 2007a; Sferratore *et al.*, 2005; Flipo *et al.*, 2007b,c) and of other basins, including the Danube (Garnier *et al.*, 2002), the Schelde (Billen *et al.*, 2005) and the Red River (Quynh, 2005).

BCs and model parameterization are briefly commented hereafter. They are described in detail by (Poulin (2006).

Measurements

The two data sets of nitrate concentrations used in this study were obtained from different measurement techniques.

Input data. The water supplier, Veolia Water, provides data sets which consist of daily concentrations, with some of them averaged from hourly measurements. Three measurement sites (Figure 1) are located at the upstream part of each modelled river (Seine and Marne) and at the confluence of the Seine River with the Oise River, which is not modelled by ProSE. These three data sets are used as upstream BCs.

Validation data. For the year 2003, the Sewage Public Company of the Greater Paris (SIAAP) provided weekly measurements at ten sampling sites (Figure 1): one on the Marne River and nine on the Seine River. For the sites where a lateral heterogeneity is observed, a measurement value consists, in the average, of three samples taken from the left side to the right side of the river. This average value on a cross section allows a longitudinal 1D description to be made.

COMBINING GEOSTATISTICS AND PHYSICALLY BASED MODELLING

Geostatistical tools: variogram and bivariate model

Some basic principles of geostatistics used in the following are briefly given in the temporal context (1D). For further developments (and the usual spatial case), one may consult (Chiles and Delfiner, 1999).

Temporal variogram. The variogram quantifies the temporal variability of a variable. Let $Z(t)$ be the value of the Z variable at the instant t . The temporal variogram $\gamma(\tau)$ is defined as half the probabilistic mean (or mathematical expectation, noted E), of the squared differences between $Z(t + \tau)$ and $Z(t)$, as a function of the time interval τ (Equation 1).

$$\gamma(\tau) = \frac{1}{2}E[(Z(t + \tau) - Z(t))^2] \quad (1)$$

By definition, $\gamma(0) = 0$. Generally, the magnitude of the increment $Z(t + \tau) - Z(t)$ increases with τ . If Z

fluctuates around a constant mean, the mean of these increments is zero, which is the reason why squared differences $(Z(t + \tau) - Z(t))^2$ are used. If the amplitude of the fluctuations is almost constant, then the random function (RF) Z is stationary (of order 2) and the variogram stabilizes around a 'sill' beyond a maximal correlation distance called 'range'.

In practice, data are available only at experimental points, from which an experimental variogram $\gamma^*(\tau)$ is calculated (*cf* section on *Introduction to geostatistics* in Appendix B). This experimental variogram is then fitted by a theoretical variogram function, with the appropriate mathematical properties (Chiles and Delfiner, 1999).

Typically, variogram $\gamma(\tau)$ can be decomposed as the sum of several components, e.g. $\gamma(\tau) = \gamma^0(\tau) + \gamma^1(\tau) + \gamma^2(\tau)$, where γ^0 admits a null range (nugget effect), γ^1 admits a range a_1 and γ^2 admits a greater range a_2 . For a phenomenon presenting a periodical component, the variogram admits a sinusoidal component with the same period as the phenomenon.

The cross-variogram describes the joint variability of two variables Z_1 and Z_2 . It is defined as half the covariance of increments according to the time interval τ :

$$\gamma_{12}(\tau) = \frac{1}{2}E[(Z_1(t + \tau) - Z_1(t))(Z_2(t + \tau) - Z_2(t))] \quad (2)$$

Unlike the 'simple' variogram, the cross-variogram can be negative when both variables, and thus their increments, are negatively correlated. When there is no temporal cross-correlation between Z_1 and Z_2 (they are temporally cross-uncorrelated), then their cross-variogram is null: $\gamma_{12}(\tau) = 0$.

Estimation: kriging and its variants. Among estimators built as a linear combination of data, kriging is defined by the following properties:

- no bias (on average, the estimation error is null);
- 'optimality': the variance of the estimation error is minimal (in other words, the precision is as best as possible).

The multivariate version of kriging is co-kriging, which consists in estimating Z_1 from measurements of Z_1 and Z_2 . Let us assume that $\gamma_{12}(\tau) \neq 0$ and thus that Z_1 and Z_2 are temporally cross-correlated. If Z_2 is denser sampled than Z_1 , then data of Z_2 can be used to interpolate the missing values of Z_1 , with respect to the probabilistic relationship between Z_1 and Z_2 . The minimization of the estimation error variance under non-bias conditions leads to a linear system that involves simple and cross-variograms of the different variables: $\gamma_1(\tau)$, $\gamma_2(\tau)$ and $\gamma_{12}(\tau)$ (section on *Estimation by co-kriging* in Appendix B).

Geostatistical bivariate model: understanding how variables are linked. Fitting simple and cross-variograms

is a way to model the link between variables. One way to understand the differences between simulations and observations is thus to analyse the fitting of their simple and cross-variograms. The geostatistical bivariate model used in this article is a very general one, the linear model of co-regionalization.

Let $O(t)$ be the observations and $S(t)$ the simulated values. In this model, both variables can be divided into n components $O_i(t)$ and n components $S_i(t)$ (Equation 3).

$$\begin{cases} O(t) = \sum_{i=1}^n O_i(t) \\ S(t) = \sum_{i=1}^n S_i(t) \end{cases} \quad (3)$$

$\forall i \neq j, O_i \perp O_j, S_i \perp S_j, O_i \perp S_j$, where $\perp$ means that the different components are temporally uncorrelated, i.e. their temporal cross-covariance (or variogram) is zero: $\forall i \neq j, \forall t, \forall t', \text{Cov}(O_i(t), O_j(t')) = 0$, written $O_i \perp O_j$.

The link between variables is described by the correlation between the n couples of components O_i and S_i . For a given i , O_i and S_i are possibly correlated, which can be written:

$$\begin{aligned} \exists \omega_i, \rho_i, \text{ and } R_i \perp S_i \mid O_i(t) = \rho_i \omega_i S_i(t) \\ + \omega_i \sqrt{1 - \rho_i^2} R_i(t) \end{aligned} \quad (4)$$

where ω_i^2 is the 'sill ratio' of $\gamma_O^i(\tau)$ and $\gamma_S^i(\tau)$, ρ_i is the correlation coefficient between O_i and S_i at the same instant t , and $R_i(t)$ is an RF temporally uncorrelated to $S_i(t)$, with a variogram proportional to the one of S_i .

Equation 4 implies that $\gamma_O^i(t) = b_{OO}^i \gamma_i(t)$, $\gamma_S^i(t) = b_{SS}^i \gamma_i(t)$ and $\gamma_{OS}^i(t) = b_{OS}^i \gamma_i(t)$, with $b_{OS}^i \leq \sqrt{b_{OO}^i b_{SS}^i}$.

Thus, $\omega_i^2 = \frac{b_{OO}^i}{b_{SS}^i}$ and $\rho_i = \frac{b_{OS}^i}{\sqrt{b_{OO}^i b_{SS}^i}}$

Figure 3 illustrates three specific versions of the linear model of co-regionalization (*cf* section on *Geostatistical bivariate models* in Appendix B) that will be found hereafter.

1. The residual model: the observations are the sum of the simulations and of another term R , which is independent of these simulations: $S \perp R$
2. The intrinsic correlation model: simple and cross-variograms are proportional to each other. The strength of the correlation between simulations and observations is given by the sill of the cross-variogram: the higher it is the stronger is the correlation. This model was already used by Chiles and Vohland (2008) to compare measurements to a physically based model of air pollution
3. The linear model of co-regionalization: each component i corresponds to the intrinsic correlation, but the combination of these components does not correspond to an intrinsic correlation (i.e. for $i \neq j$, $\rho_i \neq \rho_j$ or $\omega_i \neq \omega_j$). The analysis of relationships between variables must then be performed for each component separately.

Physics-based simulations

For this work, PROSE was run for the whole year 2003, simulating water quality on the domain (*cf* section on *Modelled area: the Seine River*) from the 1st of January to the 31st of December.

River discharges and urban hydrology. Daily river discharges were used for the Seine, Marne and Oise Rivers and for the minor tributaries. For the Seine and Marne Rivers, the upstream discharges are available. For the other tributaries, the discharge is measured or estimated close to their confluence with the Seine River. WWTP outflows and combined sewer overflows (CSOs) are measured values or estimates provided by the SIAAP. The hydraulic model describes the variation of discharge along the domain. During low discharge periods, the residence time of water might be as long as 1 month since the Seine and Marne Rivers are regulated for navigation purposes by 14 dams. At the outlet of the modelled domain, the comparison of the calculated and measured downstream discharges demonstrates that the transient

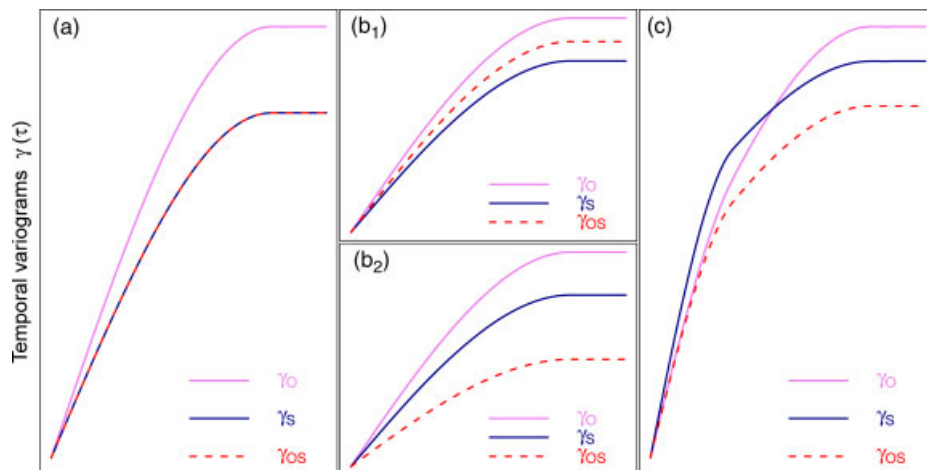


Figure 3. Possible relationships between temporal simple and cross-variograms of observations O and simulations S . (a) Residual model; (b) Intrinsic correlation model; (c) Linear model of co-regionalization (*cf* section on *Geostatistical bivariate models* in Appendix B for more details)

water balance is estimated with a good precision for the whole domain as well as the residence time for low or high discharges (Polus-Lefebvre *et al.*, 2008).

Boundary conditions. The model requires BCs for each major tributary. For the Seine and the Marne Rivers, BCs are necessary at the upstream point of the modelled domain. The third river (the Oise River) and the four minor tributaries are not modelled, so BCs are defined at their confluence with the Seine River. BCs for minor tributaries are composed of daily mean values of discharge and monthly values (one sample per month) of water quality variables. The Seine, Marne and Oise BCs are daily concentrations of all modelled variables provided by Veolia Water (*cf* section on *Input data*). They are called *initial BCs* in the rest of the article.

Statistical and geostatistical criteria for comparison

Validation data ($O(t_i)$) and ProSe outputs ($S(t_i)$) are compared for both simulations. Statistical criteria are first calculated: average, standard deviation on variables and on residuals ($\varepsilon(t_i) = S(t_i) - O(t_i)$) (Eq. 5), and as RMSE between time series $O(t_i)$ and $S(t_i)$ (Eq. 6). RMSE quantifies averaged squared differences between model and data 'point by point', at the same days.

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\varepsilon(t_i) - \bar{\varepsilon})^2} \quad (5)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \varepsilon^2(t_i)} \quad (6)$$

In addition, temporal simple and cross-variograms are used to compare the variability of modelled and measured nitrate concentrations. Simple variograms indicate

whether the modelled variability is consistent with the experimental data variability. Cross-variogram between modelled and data time series shows how they are temporally correlated. Particular attention is given to the coefficients ρ_i and ω_i for each variogram component (section on *Geostatistical bivariate model: understanding how variables are linked*).

In order to calculate simple and cross-variograms in the same conditions, ProSe outputs are sampled according to SIAAP measurement days; it means a weekly sampling, assuming that measurements are made at noon. All presented variograms are thus calculated from instantaneous weekly sampled concentrations.

RECONSTRUCTING BC BY CO-KRIGING

Preliminary exploratory analysis

First comparison concerns ProSe values and SIAAP measurements of nitrate concentrations. For most of the year, measured nitrate concentrations appear to be lower than ProSe values at almost all sites. Figure 4a summarizes this analysis by presenting the evolution along the Seine River of average differences at each site between simulated and measured nitrate concentrations over the whole year. A systematic deviation is pointed out from upstream of the domain to at least the Sartrouville site.

Two nitrate time series are available upstream of the Seine River: daily Veolia measurements used as input data and weekly SIAAP measurements at Choisy (*cf* section on *Measurements*). Both time series are compared visually (Figure 4b) and statistically (Table I); both present an annual periodicity and a high temporal correlation (*cf* Figure 4b, correlation coefficient = 0.89). But most nitrate concentrations measured by the SIAAP appear to be lower than those measured by Veolia Water.

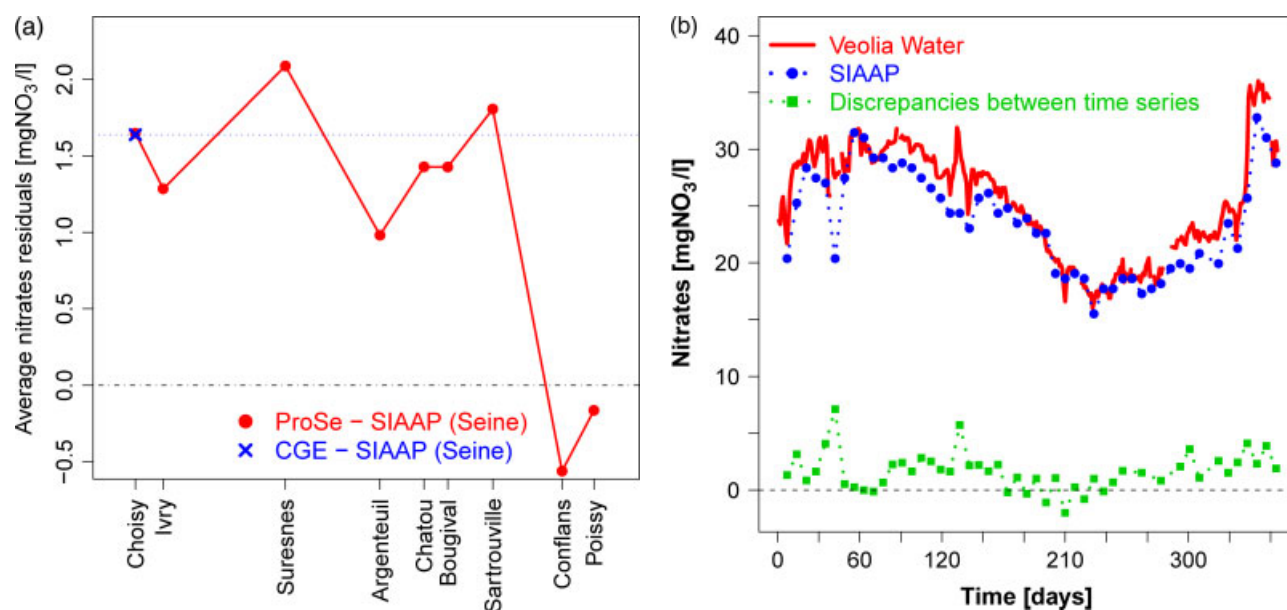


Figure 4. (a) Average deviations of nitrate concentrations between ProSe values and SIAAP measurements. (b) Comparison of nitrate concentrations upstream of the Seine River: validation data (SIAAP), input data (Veolia Water), and discrepancies between both time series

Table I. Statistics on nitrate concentrations [$\text{mg NO}_3 \text{ l}^{-1}$] in Choisy: validation data (SIAAP), input data (Veolia Water), and discrepancies between both time series; the correlation coefficient between time series is 0.89

	m	σ^2	σ	Min.	Max.
Observed nitrates (SIAAP)	23.6	20.2	4.5	15.5	32.8
Initial BC (Veolia Water)	25.5	23.3	4.8	16.0	36.0
Discrepancies	1.6	2.8	1.7	-2.0	7.1
Modified BC	23.7	19.0	4.4	15.5	33.0

m stands for the average, σ^2 for the variance and σ for the standard deviation. Comparison of initial and modified BCs.

More specifically, discrepancies are close to zero in summer (days 170–240), but during the rest of the year they are more significant and can reach $7 \text{ mg NO}_3 \text{ l}^{-1}$, i.e. a relative deviation of more than 20%.

Discrepancies between Veolia Water and SIAAP measurements can be explained by different measurement protocols and sampling strategies (*cf* section on *Measurements*). Nevertheless it is difficult to know which values are closer to reality. We decided to give the preference to SIAAP measurements because they are consistent with downstream measured values and with the monthly values given by the administration in charge of water quality control.

Reconstruction principle

In order to avoid deviations due to sampling and methodology differences and to improve the consistency between PROSE outputs and observed (SIAAP) nitrate concentrations, we decided to modify the nitrate Seine BCs. Instead of daily measurements operated by Veolia Water, SIAAP measurements at Choisy are considered for BCs in the Seine River. But anyhow, BCs must be

daily concentrations, whereas SIAAP data are weekly available.

The temporal co-kriging (*cf* sections on *Geostatistical tools: variogram and bivariate model* and *Estimation by co-kriging* in Appendix B) of weekly SIAAP measurements by daily Veolia Water measurements uses at best the cross-correlation between both time series to provide a daily time series:

- that perfectly fits SIAAP measurements;
- with the daily variability of Veolia Water measurements.

The co-kriging is thus performed assuming that the temporal variability of daily values is identical at both SIAAP (Choisy) and Veolia Water sites, located 9 km from each other. The approximation, which consists in neglecting this distance, seems reasonable since the spatial variability of nitrate concentrations is much lower than their temporal variability (Polus-Lefebvre *et al.*, 2008).

Co-kriging

First, a bivariate linear model of co-regionalization is fitted to simple and cross-variograms of SIAAP and Veolia Water measurements (Figure 5a). The resolution of the linear system developed in the section on *Estimation by co-kriging* in Appendix B gives the co-kriging weights. The resulting time series (Figure 5b) exactly fits the experimental SIAAP measurements and its variability is similar to that of Veolia Water measurements.

The same method was applied to the Oise River (*cf* Figure 1), given that SIAAP measurements are available downstream of the Oise River. From now on, these two reconstructed daily time series are called *modified BCs*.

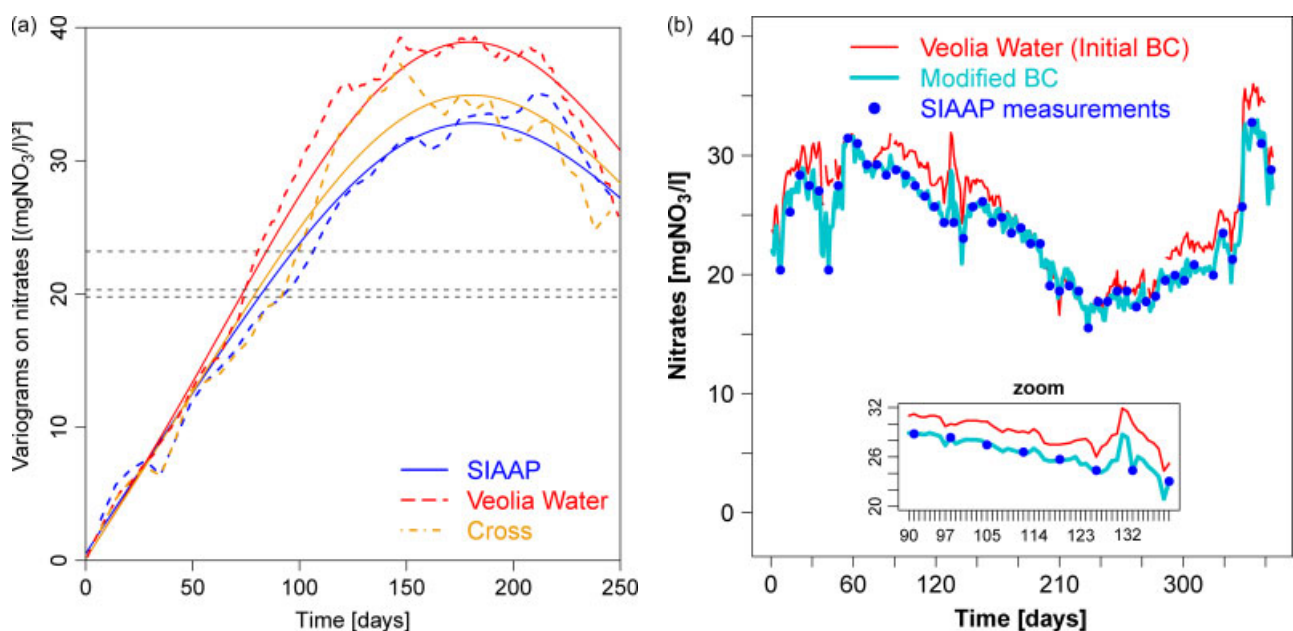


Figure 5. (a) Experimental and fitted variograms of nitrate concentrations upstream of the Seine River. (b) Comparison of nitrate time series used as BC: Veolia Water data for simulation 1 (Initial BC) and time series reconstructed by co-kriging for simulation 2 (Modified BC)

It was not possible to reconstruct consistent BCs for the Marne River. Indeed the unique measurement site providing validation data is located more than 30 km downstream of the upper limit where daily input data are needed. We have considered that it would not be consistent to use a reconstructed time series passing through experimental points that are too far. Thus, Marne River BCs remained unchanged.

A second ProSe simulation was run with the *modified* BCs obtained from co-kriging for nitrate concentrations upstream of the Seine and the Oise Rivers. All other BCs remain unchanged.

Comparing simulations with initial and modified BCs to measured nitrate

With modified BCs, simulated nitrate concentrations are more consistent with validation data (Figure 5b and 6). The averaged deviation on the domain drops from 1.1 mg NO₃ l⁻¹ to 0.1 mg NO₃ l⁻¹ (Table II). The average RMSE was also reduced from 2.3 mg NO₃ l⁻¹ to 1.8 mg NO₃ l⁻¹ when considering the modified BCs (Table II).

In general, the simulation with modified BCs gives better results than the one with the initial BC (Table II and Figure 7). This is the case for all SIAAP sites up to the junction with the Oise River. From there, statistical criteria are better for the simulation with initial BCs, and ProSe slightly underestimates nitrate concentrations at Conflans and Poissy where the average errors of estimate are -1.2 mg NO₃ l⁻¹ and -0.7 mg NO₃ l⁻¹, respectively, for the simulation with modified BCs (Table II). Based only on statistics, one could guess that this is due to underestimated fluxes in the Oise River. But looking more carefully at time series (Figure 7), one can see

Table II. Statistics on deviations of nitrate concentrations [mg NO₃ l⁻¹] between ProSe values and validation data (SIAAP), and RMSE between both time series

	m_1	m_2	σ_1	σ_2	RMSE ₁	RMSE ₂
Choisy	1.7	-0.0	1.7	1.0	2.3	1.0
Ivry	1.3	-0.3	2.7	2.7	2.1	2.7
Suresnes	2.1	1.0	1.5	1.1	2.6	1.5
Argenteuil	1.0	0.0	1.4	1.2	1.7	1.1
Chatou	1.4	0.5	1.5	1.5	2.1	1.6
Bougival	1.4	0.5	1.8	1.8	2.3	1.8
Sartrouville	1.8	0.9	1.7	1.8	2.4	2.0
Conflans	-0.6	-1.2	2.6	2.4	2.6	2.7
Poissy	-0.2	-0.7	1.9	1.7	1.9	1.8
Average	1.1	0.1	1.9	1.7	2.3	1.8

m stands for the average and σ for the standard deviation. Comparison of simulations with initial ('1') and modified ('2') BCs at all validation sites.

that ProSe outputs start to slightly diverge from observations from day 150. One explanation might be that either denitrifying bacteria dependency on temperature is overestimated in the model (the summer of 2003 was unusually dry and warm in France) or that sediment accumulation is overestimated by the model in this part of the network.

In the remaining of the article, we will thus analyse simulation outputs obtained with modified BCs, which show a better agreement with observed data.

RESULTS AND DISCUSSION

First, ProSe outputs are compared to validation data using usual statistical tools, then a more detailed analysis involving geostatistical tools is presented.

Classical result analysis

First, statistical criteria (*cf* section on *Statistical and geostatistical criteria for comparison*) are used to compare ProSe values to SIAAP measurements at each validation site (Table III), complementary to visual comparison that can be made on Figure 7. As seen when comparing initial and modified BCs, the annual mean nitrate concentration is well estimated by ProSe at each validation site, with small differences, either positive or negative. The temporal variability is slightly underestimated by the model at almost all sites, ProSe values presenting standard deviations ranging from 3.3 to 4.5 mg NO₃ l⁻¹ against a range from 3.7 to 4.5 mg NO₃ l⁻¹ for SIAAP measurements. Moreover, the correlation coefficients are very high ($\rho > 0.9$) and RMSE (*cf* Equation 6) are close to 1, except at Ivry ($\rho = 0.74$ and $RMSE = 2.7$ mg NO₃ l⁻¹) and Conflans ($\rho = 0.84$ and $RMSE = 2.7$ mg NO₃ l⁻¹).

The statistical criteria and the visual comparison of simulated and observed nitrate concentrations lead to the same conclusion: nitrate seems well simulated by the ProSe model for the year 2003.

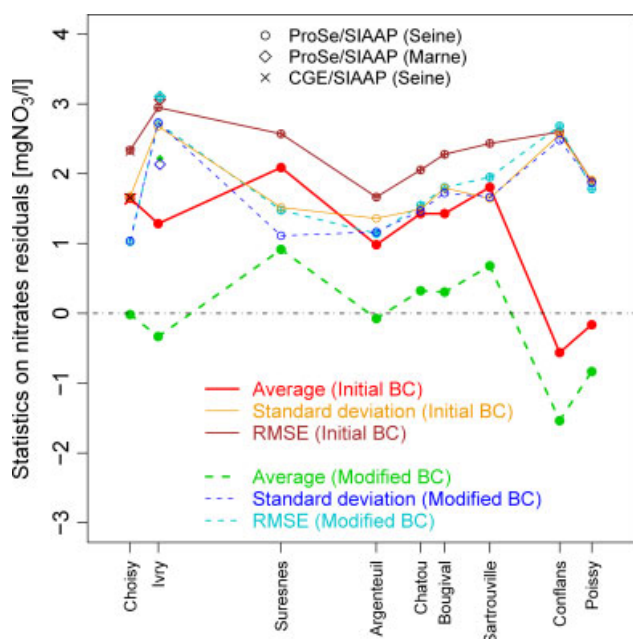


Figure 6. Statistics on deviations of nitrate concentrations between ProSe values and SIAAP measurements from upstream to downstream; comparison of initial and modified BC

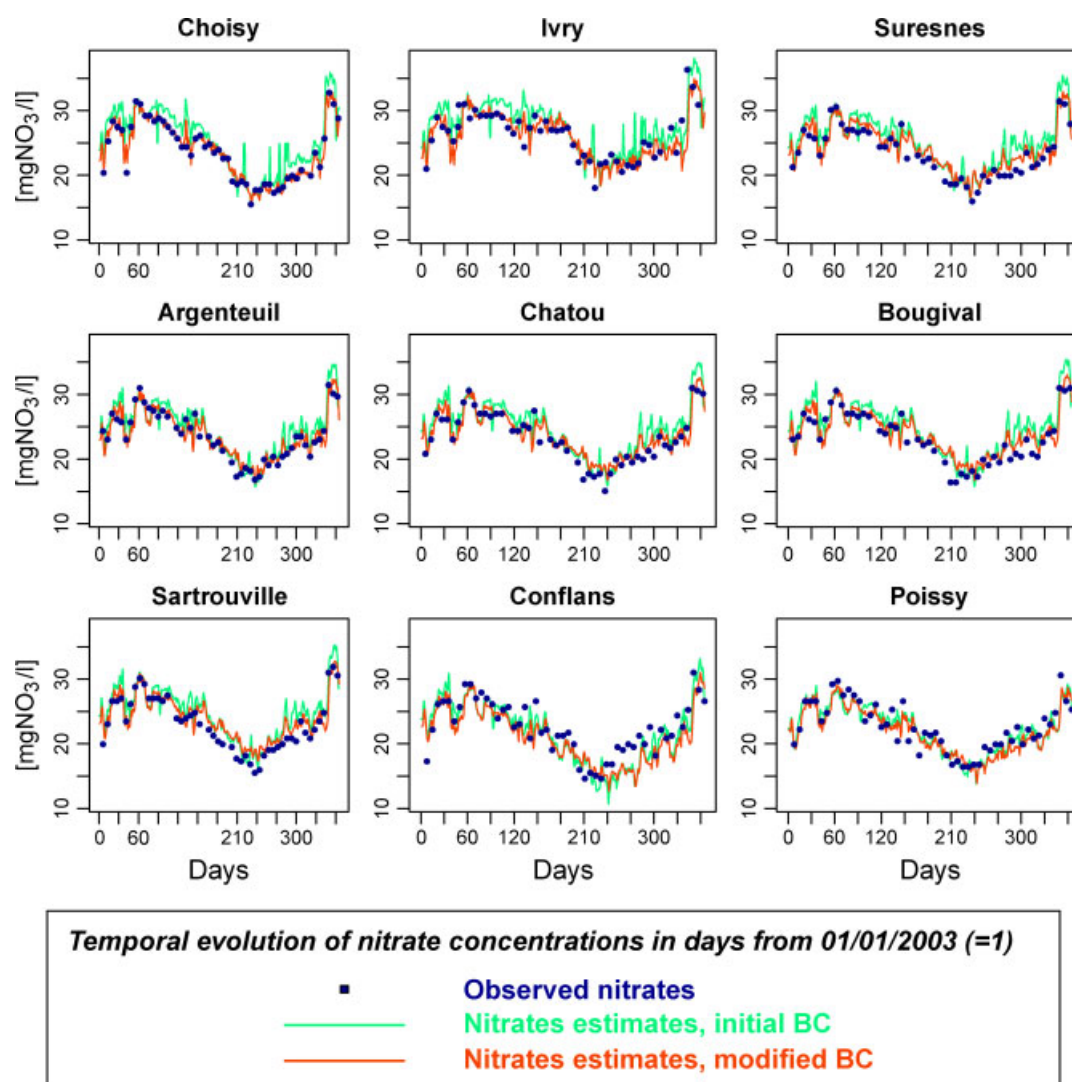


Figure 7. Comparison of modelled (ProSe) and measured (SIAAP) nitrate concentrations in 2003 at each measurement site. The two simulations with different BC are also compared. All sites are presented from upstream (Choisy) to downstream (Poissy) along the Seine River

Table III. Statistics on nitrate concentrations [$\text{mg NO}_3 \text{ l}^{-1}$] in all validation sites: comparison of ProSe values and SIAAP measurements

Site	SIAAP		ProSe		ρ	RMSE
	m	σ	m	σ		
Choisy	23.6	4.5	23.6	4.5	1.0	1.0
Ivry	26.2	3.7	25.8	3.7	0.7	2.7
Suresnes	23.5	3.8	24.3	3.3	1.0	1.5
Argenteuil	23.6	3.9	23.6	3.8	1.0	1.1
Chatou	23.4	4.0	23.7	3.7	1.0	1.6
Bougival	23.4	3.9	23.8	3.6	0.9	1.8
Sartrouville	23.1	4.2	23.8	3.5	0.9	2.0
Conflans	22.4	4.1	20.8	4.4	0.8	2.7
Poissy	22.6	3.7	21.7	3.7	0.9	1.8

m , σ , ρ , and $RMSE$, respectively stand for mean, standard deviation, correlation coefficient and RMSE.

Result analysis using fitted variograms

The observed and the ProSe simple and cross-experimental variograms are fitted at each gauging site

with a linear model of co-regionalization. The corresponding simple and cross-modelled variograms are called γ_O , γ_S and γ_{OS} , respectively (Figure 8 and Table IV).

The linear model of co-regionalization is a combination of the following three components:

- a nugget effect which integrates sub-weekly variability and sampling uncertainty. It accounts for less than 5% of the total variance at each gauging station;
- an exponential variogram which corresponds to a decreasing correlation with time increase. For every site, a range of about 1 month is observed. It accounts for around 20% of the total variance;
- a periodic component with an annual period. This is the major component since it accounts for around 75% of the total variance. This periodical structure is consistent with the seasonal variability observed on time series (Figure 7), which might be related to bacterial activity and temperature annual variations: denitrification activity is the highest in late summer due to high water temperature. The annual minimum

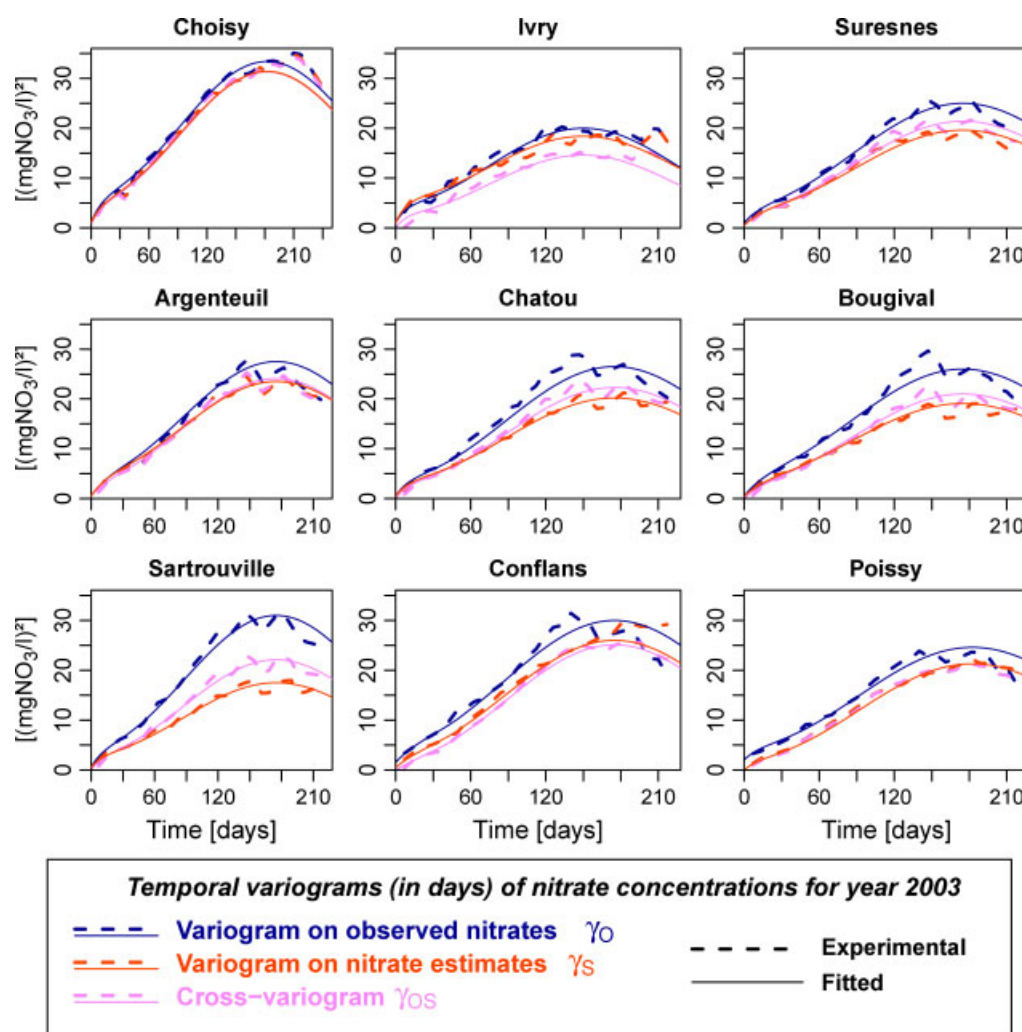


Figure 8. Fitted temporal simple and cross- (γ_{OS}) variograms of measured (SIAAP, γ_O) and modelled (PROSE, γ_S) nitrate concentrations at each measurement site, with a linear model of co-regionalization

Table IV. Fitting of variograms composed of three terms: nugget effect, exponential component and periodic component

Gauging station		Nugget effect			Exponential			Periodic (cosinus)			Global sill		
		γ_{obs}	γ_{prose}	γ_{cross}	γ_{obs}	γ_{prose}	γ_{cross}	γ_{obs}	γ_{prose}	γ_{cross}	γ_{obs}	γ_{prose}	γ_{cross}
Choisy	Sill $[(mg\ l^{-1})^2]$	1	1	0.7	6	5	5	26.4	25.4	25.6	33.4	31.4	31.3
	Range or period* [d]				35	35	35	365	365	365			
Ivry	Sill $[(mg\ l^{-1})^2]$	1	1	0	4	5	3	15	12.4	11.6	20	18.4	14.6
	Range or period [d]				25	25	25	300	300	300			
Suresnes	Sill $[(mg\ l^{-1})^2]$	1	0.5	0.5	4	3.5	3.5	20	15.6	17.4	25	19.6	21.4
	Range or period [d]				40	40	40	350	350	350			
Argenteuil	Sill $[(mg\ l^{-1})^2]$	0.5	0.5	0.5	5	5	4	22	18	19.6	27.5	23.5	24.1
	Range or period [d]				45	45	45	350	350	350			
Chatou	Sill $[(mg\ l^{-1})^2]$	0.5	0.5	0	4	3.5	3.5	22	16.2	18.8	26.5	20.2	22.3
	Range or period [d]				30	30	30	350	350	350			
Bougival	Sill $[(mg\ l^{-1})^2]$	0.5	0.5	0	5.5	5.5	4	20	14.6	17	26	19.1	21
	Range or period [d]				50	50	50	350	350	350			
Sartrouville	Sill $[(mg\ l^{-1})^2]$	0.5	0.5	0	4.5	3	3.5	26	14	18.6	31	17.5	22.1
	Range or period [d]				35	35	35	350	350	350			
Conflans	Sill $[(mg\ l^{-1})^2]$	1.5	0.5	0	4.5	3.5	2.5	24	22	22.6	30	26	25.1
	Range or period [d]				45	45	45	350	350	350			
Poissy	Sill $[(mg\ l^{-1})^2]$	2	0	0	3	2.5	2.5	19.6	18.8	18.8	24.6	21.3	21.3
	Range or period [d]				35	35	35	365	365	365			

γ_{obs} : variogram of measurements; γ_{prose} : variogram of simulated values; γ_{cross} : cross-variogram. * Range for the exponential component and period for the cosinus component.

observed for nitrate concentrations might also be related to river discharge, which produces dilution. During low water season, nitrate are mainly brought to the rivers from aquifers (where the concentration is stable or in slow evolution), the surface runoff contribution, with higher nitrate concentrations, being negligible at this time. This periodical structure was confirmed at each SIAAP sampling site on 3-year records (from 2001 to 2003) (Figure 9).

Globally, ProSe variograms present similar patterns than the observed ones, but ProSe always underestimates the nitrate temporal variability, with a global sill ratio ranging from 0.57 to 0.94 (Table V). It confirms and reinforces the slight underestimation highlighted in the previous section based on classical statistics.

Fitting a variogram model to experimental variograms provides information about the link between simulated and observed values. Pointing out changes in variogram

patterns from upstream to downstream allows modifications of the link between model and measurements to be located. Then the 'approximation' (either in processes, parameters or data) responsible for each change can be characterized through the joint analysis of the different components, the time series and the classical statistics.

Before analysing further the variogram changes from upstream to downstream, it is important to keep in mind that for each component of the fitted variograms, the sill ratio between simple variograms gives an indication about the ratio of the fluctuation amplitude. A sill ratio equals to 1 indicates that the amplitude of ProSe temporal fluctuations is similar to that observed. Otherwise, this amplitude is either over (>1) or underestimated (<1). Conversely, the correlation coefficient provides information on the similarity of both series. $\rho = 1$ indicates that both time series evolve similarly, whereas $\rho = 0$ indicates that the time series are not correlated at all.

As BCs were modified to build a consistent dataset, the differences between γ_O and γ_S , as well as the position of γ_{OS} , are due to an inadequate quantification of inputs to the river and to approximations into the description of physical processes within the river (i.e. an approximate description of phenomenon and/or an approximate parameterization of the model, 1D modelling). From upstream to downstream of the modelled area, the variogram patterns evolve as follows (Table IV and V):

From Choisy to Ivry. At Choisy, upstream of the domain, the model works properly: $\gamma_{OS} \approx \gamma_S \approx \gamma_O$. But at Ivry $\gamma_{OS} < \gamma_S < \gamma_O$ and the determination coefficient ρ^2 is only 0.5 ($\rho = 0.71$ in Table V). The temporal correlation is the weakest overall in the modelled area, especially for the exponential component and the nugget effect. Among all sites, the sill of γ_O is here the lowest one because of the low sill of the periodic component which is only $15 \text{ (mg NO}_3 \text{ l}^{-1})^2$. ProSe also reproduces the reduction in the global and periodic sills but it overestimates this reduction (Table IV). At Ivry, the range of the exponential component is the lowest one as well (25 days). During spring and winter (around 150 days), nitrate concentrations vary between 26 and $31 \text{ mg NO}_3 \text{ l}^{-1}$, which induces a reduction in the global

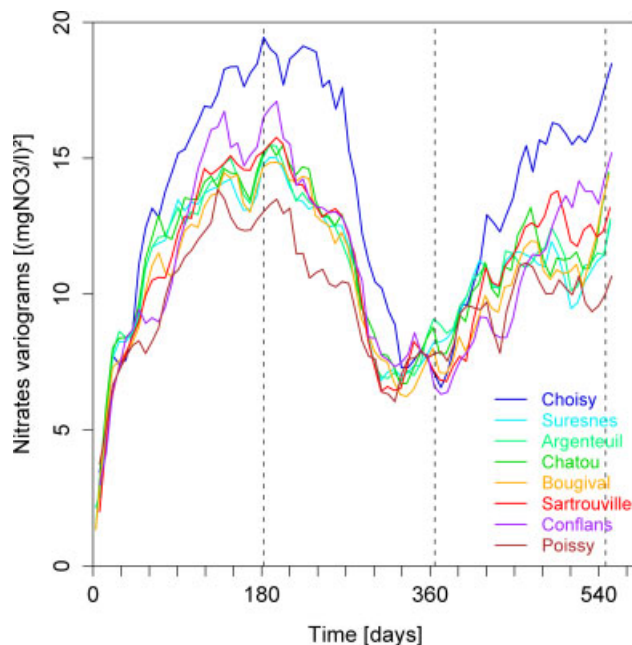


Figure 9. Temporal simple variograms of weekly measured nitrate concentrations by the SIAAP, for the 3 years 2001 to 2003

Table V. Variogram analysis

Gauging station	ρ				Sill ratio			
	nug	exp	perio	global	nug	exp	perio	global
Choisy	0.7	0.91	0.99	0.97	1	0.83	0.96	0.94
Ivry	0	0.67	0.85	0.71	1	1.25	0.83	0.92
Suresnes	0.71	0.94	0.99	0.96	0.5	0.88	0.78	0.78
Argenteuil	1	0.8	0.98	0.95	1	1	0.82	0.86
Chatou	0	0.94	1	0.93	1	0.88	0.74	0.76
Bougival	0	0.85	0.99	0.9	1	0.73	0.73	0.74
Sartrouville	0	0.95	0.97	0.92	1	0.67	0.54	0.57
Conflans	0	0.63	0.98	0.83	0.33	0.78	0.92	0.87
Poissy	0	0.91	0.98	0.90	0	0.83	0.96	0.87

ρ : correlation coefficient between measurements and ProSe outputs. Sill ratio: $silly_{prose}/silly_{obs}$. nug, exp, and perio stand for the nugget effect, the exponential and the periodical component, respectively.

sill. Simulated and observed values seem in agreement: Figure 7 indicates that γ_O and γ_S do represent the same process. But, Figure 8 shows that the two variables are poorly correlated (the cross-variogram is lower than the simple ones). This discrepancy between the PROSE values and the observed values might be due to a wrong quantification of the outflow either of the Seine Amont WWTP located in the city of Valenton or of an important CSO located in this river section. The Seine Amont WWTP treats the waste waters from 1.8 M inhabitants and the mean concentration of nitrate in its outflow is $102 \text{ mg NO}_3 \text{ l}^{-1}$, whereas the discharge of the CSO varies between 0.5 and $6 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ and its nitrate concentration is poorly known.

From Ivry to Suresnes. At Suresnes, the variogram pattern changes to $\gamma_S < \gamma_{OS} < \gamma_O$. The discontinuity between Ivry and Suresnes is due to the Marne River, which represents a significant contribution to the Seine discharge after the confluence of the two rivers.

From Suresnes to Sartrouville. From Suresnes to Sartrouville, PROSE does not simulate in a satisfactory way the periodic component of γ_O (sill ratio ω_{perio} ranging between 0.54 and 0.82) even if the correlation coefficients are good (between 0.97 and 1). This is almost the same for the exponential component, except for Argenteuil where the sill ratio equals 1. For this group of sites, the variogram analysis reveals that PROSE reproduces more or less the nitrate fluctuations but reduces the temporal variability. Between Suresnes and Argenteuil, there is almost no difference between the variogram patterns although a major CSO is located in this river section. The CSO seems to be properly characterized (in time, discharge and concentrations) since, in Argenteuil, the three variograms are very similar (Figure 8). There are no significant inputs (WWTP, confluence or CSO) between Argenteuil and Sartrouville, but discrepancies between variogram sills increase from upstream to downstream. Thus, this discrepancy between γ_O and γ_S can be explained by the fact that the physical processes are not modelled properly and/or that the parameter values are not well calibrated. Figure 7 suggests an explanation for the source of this discrepancy. Indeed for Chatou, Bougival and Sartrouville, the simulated concentrations are overestimated from day 150 to the end of the simulation. This can be explained by an overestimation of the nitrification or an underestimation of the denitrification within sediments that affects the nitrate concentrations in the water column due to diffusion at the sediment-water interface. This is confirmed by the fact that temporary inputs such as CSO do have a significant effect on the long-term variability of the nitrate concentrations in the river (Even, 2007a) due to sedimentation processes.

From Sartrouville to Conflans. At Conflans, the experimental variograms are crossing each other. This indicates that the three components of the linear model of co-regionalization interact in a complex way, but the

$\gamma_{OS} < \gamma_S$ for the first 4 months (<120 days, Figure 8). Figure 7 indicates that the nitrate concentrations simulated by PROSE are underestimated from the late summer to the end of the year. The global determination coefficient ρ^2 is only 0.69 ($\rho = 0.83$ in Table V). The periodic component is consistent between γ_O and γ_S . The main issue is due to the exponential component and the nugget effect: the components corresponding to sub-weekly (nugget effect) and monthly (exponential component) variabilities are not well reproduced by PROSE. In addition, contrary to the other sites, most of the simulated values are underestimated (Figure 7). This might be explained by an overestimation of the denitrification by the model in the Seine River. An overestimation of the denitrification process seems realistic since an important sedimentation prevails in this area and denitrification in this context is difficult to simulate accurately.

From Conflans to Poissy. At Poissy, the periodic component of γ_S is consistent with the observed one with $\rho = 0.98$ and a sill ratio of 0.96 (Table V). For the exponential component, the sill ratio is only 0.83, but the determination coefficient ρ^2 is 0.83 ($\rho = 0.91$). The main point at Poissy is revealed by the nugget effect ($2 (\text{mg NO}_3 \text{ l}^{-1})^2$ in Table IV). It is the highest observed nugget effect among those calculated at the measurement sites, whereas it is null when calculated from the PROSE results. The change in the variogram pattern might be due to the confluence of the Seine and the Oise Rivers. The fact that γ_O and γ_S are not equal also results from all modelling approximations previously mentioned.

CONCLUSION

The exploratory geostatistical analysis enables us to point out and to better understand errors in data used as model inputs and errors in data used to compare model outputs with.

Co-kriging made possible the building of a consistent homogeneous dataset of upstream BCs (input data) and of data validation.

After this data processing, the PROSE model was run to simulate water quality in the river. The comparison of the simulated values with the observed ones leads to the conclusion that nitrate are rather well simulated by the model. The statistical single criteria (average values, standard deviation and RMSE) seem to be also good.

But the analysis of simple variograms of observed and simulated nitrate and their cross-variogram reveals a clear mismatch between the simulated values and the observed ones that was not revealed by the other objective functions. It also makes it possible to analyse the model response with regard to measurements in terms of three different time step responses (sub-weekly, monthly and annual). Moreover, as BCs were processed in order to obtain a consistent dataset, mismatches were analysed as inadequate quantification of inputs to the river and an approximated description of the physical processes

within the river. This analysis results in pointing out (i) model inconsistencies in terms of input data (tributary, CSO, WWTP contributions to the nitrate fluxes in the Seine River) and (ii) wrong descriptions of the physical processes, either conceptual or due to the parameter calibration. It therefore helps to identify more precisely the uncertainty sources due to sub-optimal parameter values and internal model structure, and to locate them in the modelled area.

Finally, this type of analysis should be developed in distributed modelling more widely in order to improve model quality by understanding and characterizing different types of uncertainty sources.

ACKNOWLEDGEMENTS

This research project was granted by the Carnot MINES Institute, and part of the PIREN Seine research program on the Seine Basin. The authors are grateful to SIAAP (Sewage Public Company of the Greater Paris), to VNF (National Organisation for River Navigation, in charge of Surface Water Quality Control) and Veolia Water for the data they supplied and the interesting discussions concerning the Seine River water quality. The authors are also grateful to the reviewers for their attentive reading and their useful comments.

REFERENCES

- Ambrose R, Barnwell T, McCutcheon S, Williams J. 1996. Water resources handbook. *Computer Models for Water Quality Analysis*. McGraw-Hill: New York. Chapter 14.
- Ambrose RB, Wool TA, Wool JP, Schanz RW. 1988. WASP4, A hydrodynamic and water quality model. *Model Theory, User's Manual Guide and Programmer's Guide*. US Environmental Protection Agency: Athens, GA, USA.
- Anderton S, Latron J, Gallart F. 2002a. Sensitivity analysis and multiresponse, multi-criteria evaluation of a physically based distributed model. *Hydrological Processes* **16**: 333–353.
- Anderton S, Latron J, White S, Llorens P, Gallart F, Salvany C, O'Connell P. 2002b. Internal evaluation of a physically based distributed model using data from a Mediterranean mountain catchment. *EGS* **6**(1): 67–83.
- Arheimer B, Olsson J. 2003. Integration and coupling of hydrological models with water quality models: applications in Europe. Technical Report, Workgroup Report, WMO RA VI (K55-1-02).
- Arhonditsis G, Brett M. 2004. Evaluation of the current state of mechanistic aquatic biogeochemical modeling. *Marine Ecology Progress Series* **271**: 13–26.
- Bagnold R. 1966. An Approach to the Sediment Transport Problem from General Physics. Physiographic and Hydraulic Studies of Rivers. Technical Report., Geological Survey Professional paper 422-I.
- Barnwell T, Brown L, Whittemore R. 1987. QUAL2E - a case study in water quality modelling software. *Systems Analysis in Water Quality Management*. Pergamon Press: New York; 377–387.
- Beven K. 1989. Changing ideas in hydrology: the case of physically-based model. *Journal of Hydrology* **105**: 157–172.
- Beven K. 1993. Prophecy, reality and uncertainty in distributed hydrological modelling. *Advances in Water Resources* **16**: 41–51.
- Beven K. 2006a. A manifesto for the equifinality thesis. *Journal of Hydrology* **320**: 18–36.
- Beven K. 2006b. On undermining science? *Hydrological Processes* **20**: 3141–3146.
- Billen G, Garnier J, Hanset P. 1994. Modelling phytoplankton development in whole drainage networks: the RIVERSTRAHLER model applied to the Seine river system. *Hydrobiologia* **289**: 119–137.
- Billen G, Garnier J, Meybeck M. 1998. Les sels nutritifs : l'ouverture des cycles. *La Seine en son bassin. Fonctionnement écologique d'un système fluvial anthropisé*. Elsevier: Paris, France; 531–535.
- Billen G, Garnier J, Rousseau V. 2005. Nutrient fluxes and water quality in the drainage network of the scheldt basin over the last 50 year. *Hydrobiologia* **540**(1–3): 47–67.
- Billen G, Servais P. 1989. Modélisation des processus de dégradation bactérienne de la matière organique en milieu aquatique. In *Micro-organismes dans les écosystèmes océaniques*, Bianchi M (ed.) Masson: Paris; 219–245.
- Billen G, Servais P, Becquevort S. 1990. Dynamics of bacterioplankton in oligotrophic and eutrophic aquatic environments: bottom-up or top-down control? *Hydrobiologia* **207**(1): 37–42.
- Billen G, Garnier J, Ficht A, Cun C. 2001. Ecological modeling of the 50 last years of anthropogenic impact in the seine estuary. *Estuaries* **24**(6): 977–993.
- Boudreau BP. 1997. *Diagenetic Models and their Implementation*. Springer: Berlin, Germany.
- Brown LC, Barnwell TO. 1987. Enhanced stream water quality models, QUAL2E and QUAL2E UNCAS—Documentation and user's TechReport. US EPA.
- Butts M, Payne J, Kristensen M, Madsen H. 2004. An evaluation of the impact of model structure on hydrological modelling uncertainty for streamflow simulation. *Journal of Hydrology* **298**: 242–266.
- Casper M, Vohland M. 2008. Validation of a large scale hydrological model with data fields retrieved from reflective and thermal optical remote sensing data—a case study for the upper rhine valley. *Physics and Chemistry of the Earth* **33**: 1061–1067.
- Chilès J-P, Delfiner P. 1999. *Geostatistics: Modeling Spatial Uncertainty*. Wiley: New-York.
- Chilès J-P, Séguret S, Riboud P-M. 2008. Geostatistical analysis of validation data of an air pollution simulator. In Proceedings of the 8th International Geostatistics Congress, Santiago, Chile, vol. 2; 861–870.
- Crabtree R, Gent R, Clifforde I. 1994. Controlling pollution from combined sewer overflows: practical experience of applying an integrated approach in the UK. *Genie-Urbain-Genie Rural* **5**: 269–272.
- de Fouquet C. 2006. La modélisation géostatistique des milieux anthropisés. Académie de Paris, Université Pierre et Marie Curie.
- Ebel B, Loague K. 2006. Physics-based hydrologic-response simulation: seeing through the fog of equifinality. *Hydrological Processes* **20**: 2887–2900.
- Even S, Mouchel J-M, Servais P, Flipo N, Poulin M, Blanc S, Chabanel M, Paffoni C. 2007. Modeling the impacts of combined sewer overflows on the river Seine water quality. *Science of the Total Environment* **375**(1–3): 140–151.
- Even S, Poulin M, Garnier J, Billen G, Servais P, Chesterikoff A, Coste M. 1998. River ecosystem modelling: application of the PROSE model to the Seine river (France). *Hydrobiologia* **373**: 27–37.
- Even S, Poulin M, Mouchel J-M, Seidl M, Servais P. 2004. Modelling oxygen deficits in the Seine river downstream of combined sewer overflows. *Ecological Modelling* **173**: 177–196.
- Fischer H., Pusch M. 2001. Comparison of bacterial production in sediments and epiphyton and the pelagic zone of a lowland river. *Freshwater Biology* **46**: 1335–1348.
- Flipo N, Even S, Poulin M, Tusseau-Vuillemin M-H, Améziane T, Dauta A. 2004. Biogeochemical modelling at the river scale: Plankton and periphyton dynamics—Grand Morin case study, France. *Ecological Modelling* **176**: 333–347.
- Flipo N, Even S, Poulin M, Théry S, Ledoux E. 2007a. Modelling nitrate fluxes at the catchment scale using the integrated tool CAWAQS. *Science of the Total Environment* **375**: 69–79.
- Flipo N, Jeannée N, Poulin M, Even S, Ledoux E. 2007b. Assessment of nitrate pollution in the Grand Morin aquifers (France): combined use of geostatistics and physically-based modeling. *Environmental Pollution* **146**(1): 241–256.
- Flipo N, Rabouille C, Poulin M, Even S, Tusseau-Vuillemin M, Lalande M. 2007c. Primary production in headwater streams of the Seine basin: the Grand Morin case study. *Science of the Total Environment* **375**: 98–109.
- Garnier J, Billen G, Coste M. 1995. Seasonal succession of diatoms and chlorophyceae in the drainage network of the river Seine: observations and modelling. *Limnology and Oceanography* **40**(4): 750–765.
- Garnier J, Billen G, Hannon E, Fonbonne S, Videnina Y, Soulie . 2002. Modeling transfer and retention of nutrients in the drainage network of the danube river. *Estuarine Coastal And Shelf Science* **54**: 285–308.
- Garnier J, Billen G, Hanset P, Testard P, Coste M. 1998. Développement algal et eutrophisation dans le réseau hydrographique de la Seine. In *La Seine en son bassin-Fonctionnement écologique d'un système fluvial*

- anthropisé, Meybeck M, de Marsily G., Fustec E (eds). Elsevier: Paris, France; 593–626.
- Garnier J, Billen G, Sanchez N, Leporcq B. 2000. Ecological functioning of the Marne reservoir (upper Seine basin, France). *Regulated Rivers-Research & Management* **16**: 51–71.
- Garnier J, Némery J, Billen G, Théry S. 2005. Nutrient dynamics and control of eutrophication in the Marne river system: modelling the role of exchangeable phosphorus. *Journal of Hydrology* **304**: 397–412.
- Güntner A, Uhlenbrook S, Seibert J, Leibundgut C. 1999. Multicriterial validation of TOPMODEL in a mountainous catchment. *Hydrological Processes* **13**: 1603–1620.
- Ivanov P, Masliev I, Kularathna M, De Marchi C, Somlyódy L. 1996. DESERT User's manual. Technical Report. International Institute for Applied Systems Analysis, Austria - Institute for Water and Environmental Problems: Russia.
- Lancelot C, Veth C, Mathot S. 1991. Modelling ice-edge phytoplankton bloom in the scotia-weddell sea sector of the southern ocean during spring 1998. *Journal of Marine Systems* **2**: 333–346.
- Maldiney M-A. 1994. Caractéristiques physiques des particules en suspension dans un fleuve canalisé, exemple de la Seine. PhD thesis. Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- McCarter L. 1999. The multiple identities of vibrio parahaemolyticus. *Journal of Molecular Microbiology and Biotechnology* **1**(1): 51–57.
- Nash J, Sutcliffe J. 1970. River flow forecasting through conceptual models. Part I, a discussion of principles. *Journal of Hydrology* **10**: 282–290.
- Polus-Lefebvre E, de Fouquet C, Bernard-Michel C, Flipo N, Poulin M. 2008. Geostatistical model for concentrations or flow rates in streams: some results. In Proceedings of the 8th International Geostatistics Congress, Santiago, Chile, vol. 2; 871–880.
- Poulin M. 2006. Réalisation de simulations ProSe - Année de référence 2003. Technical Report. Centre de Géosciences - Mines ParisTech: Paris, France.
- Prosser I, Rustumji P. 2000. Sediment transport capacity relations for overland flow. *Progress in Physical Geography* **24**(2): 179–193.
- Quynh L, Billen G, Garnier J, Théry S, Fezard C, Minh C. 2005. Nutrient (N,P) budgets for the Red River basin (Vietnam and China). *Global Biogeochemical Cycles* **19**(2): GB2002.
- Refsgaard J. 1997. Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models. *Journal of Hydrology* **198**: 69–97.
- Reichert P. 1994. AQUASIM- a tool for simulation and data analysis of aquatic systems. *Water Science and Technology* **30**(2): 21–31.
- Reichert P, Borchardt D, Henze M, Rauch W, Shanahan P, Somlyódy L, Vanrolleghem P. 2001a. River water quality model No.1. Technical Report. IWA: London, UK.
- Reichert P, Borchardt D, Henze M, Rauch W, Shanahan P, Somlyódy L, Vanrolleghem P. 2001b. River water quality model no. 1: II. biochemical process equations. *Water Science and Technology* **43**(5): 11–30.
- Sferratore A, Billen G, Garnier J, Théry S. 2005. Modeling nutrient (N,P,Si) budget in the Seine watershed: application of the Riverstrahler model using data from local to global scale resolution. *Global Biogeochemical Cycles* **19**(4): GB4S07.
- Streeter H, Phelps EB. 1925. A study of the pollution and natural purification of the Ohio River. Technical Report Public Health Bulletin No. 146. U.S. Public Health Service, Treasury Department: Washington, DC.
- Tayfur G. 2002. Applicability of sediment transport capacity models for nonsteady state erosion from steep slopes. *Journal of Hydrologic Engineering* **7**(3): 252–259.
- Wells S. 2000. Hydrodynamic and water quality river basin modelling using CE-QUAL version3. In *Development and Application of Computer Technics to Environmental Studies*, Ibarra-Berastegi G, Brebbia C, Zannetti P (eds). WIT Press: Boston, MA.
- Wool T, Ambrose R, Martin J, EC. 2001. Water Quality Analysis Simulation Program (WASP) version 6.0 - User's manual. Technical Report. US EPA: Athens, GA, USA.
- Yang C. 1996. *Sediment Transport Theory and Practice*. McGraw-Hill: New York.

APPENDIX A: DESCRIPTION OF THE PROSE MODEL

In the following paragraphs, the biogeochemical part of PROSE is summarized. A few parameters are temperature

dependent (i.e. they are multiplied by a function of the water temperature expressed in °C, $f(T)$) as follows:

$$f(T) = f(T_{\text{opt}})e^{-(T-T_{\text{opt}})^2/\sigma^2} \quad (7)$$

where T_{opt} is the optimal temperature (maximum of f), and σ is the standard deviation of T time series. In the remaining, those parameters are represented with the symbol T .

Primary Producers

The conceptual scheme used to model the dynamics of PPs was developed by (Lancelot *et al.*, 1991). It is based on the interpretation of experiments incorporating marked carbon into various cell constituents. PP growth follows a photosynthesis-irradiance law:

$$P(z) = P_{\text{max}}^T (1 - e^{-\alpha I(z)/P_{\text{max}}^T}) e^{-\beta I(z)/P_{\text{max}}^T} \quad (8)$$

where P_{max}^T is the maximum photosynthesis production rate ($[T^{-1}]$), $P(z)$ the actual growth rate at z ($[T^{-1}]$), $I(z)$ the actual irradiance at z ($[\mu\text{E L}^{-2}\text{T}^{-1}]$), α the slope of the light-limited portion of $P - I$ curve or the photosynthesis capacity ($[L^2]$), and β the photoinhibition coefficient ($[L^2 \mu\text{E}^{-1}]$).

The actual irradiance at z follows a Beer-Lambert law:

$$I(z) = I_0 e^{-\eta z} \quad (9)$$

where I_0 is the light intensity at the water surface ($[\mu\text{E L}^{-2}\text{T}^{-1}]$), η is the actual light extinction ($[L^{-1}]$) depending on suspended matter concentration (SM , $[ML^{-3}]$):

$$\eta = \eta_{\text{const}} + \eta_{SM} SM \quad (10)$$

with η_{const} the water light extinction coefficient ($[L^{-1}]$) and η_{SM} the light extinction due to SM ($[L^{-1}]$).

The maximum rate of growth for primary producers ($\mu_{\text{max},PP}$, $[T^{-1}]$) is then calculated by integrating $P(z)$ over the water column depth (h , $[L^{-1}]$):

$$\mu_{\text{max},PP} = \frac{1}{h} \int_0^h P(z) dz \quad (11)$$

The actual growth rate (μ_{PP} , $[T^{-1}]$) is weighted by nutrient concentrations in the following way:

$$\mu_{PP} = \mu_{\text{max},PP} \frac{N}{N + K_N} \frac{PO_4}{PO_4 + K_{PO_4}} \quad (12)$$

where N is the concentration of nitrogen (either ammonium or nitrate) that is consumed by PP ($[ML^{-3}]$), PO_4^{3-} is orthophosphate concentration ($[ML^{-3}]$), K_i is the half saturation constant for the i^{th} species ($[ML^{-3}]$).

Losses (L in Equation 13, $[T^{-1}]$) are due to respiration (R_{tot} in Equation 14, $[T^{-1}]$), mortality ($Mort_{PP}^T$, $[T^{-1}]$) and sedimentation:

$$L = R_{\text{tot}} + Mort_{PP}^T + \frac{V_{\text{sed},PP}}{h} \quad (13)$$

$$R_{\text{tot}} = R_M^T + R_{\mu}\mu \quad (14)$$

where R_M^T is the basic respiration rate ($[T^{-1}]$), R_μ is the respiration rate due to growth (without dimension), and $V_{sed,i}$ the sedimentation velocity of the i^{th} species ($[LT^{-1}]$).

Finally, the variation of the PP concentration ($[ML^{-3}]$) over a time step dt is given by:

$$\frac{dPP}{dt} = \left(\mu_{PP} - R_{tot} - Mort_{PP}^T - \frac{V_{sed,PP}}{h} \right) PP \quad (15)$$

Bacteria

The evolution of organic matter (particulate and dissolved) and heterotrophic bacteria (HB) populations is based on the HSB model (Billen and Servais, 1989). The variation of HB concentration ($[ML^{-3}]$) is represented by:

$$\frac{dHB}{dt} = \left(\mu_{max,HB}^T \frac{O_2}{K_{O_2} + O_2} \frac{DOM}{K_{DOM} + DOM} - \frac{V_{sed,HB}}{h} - Mort_{HB}^T \right) HB \quad (16)$$

where DOM is the concentration of dissolved organic matter ($[ML^{-3}]$). If the oxygen concentration is lower than $O_{2,denit}$ (fitted at $1 \text{ mgO}_2 \text{ L}^{-1}$), then HB use nitrates to oxidize the dissolved organic matter. The O_2 threshold represents the denitrifying process.

The variation of nitrifying bacteria concentration (NB, $[ML^{-3}]$) is represented by:

$$\frac{dNB}{dt} = \left(\mu_{max,NB}^T \frac{O_2}{K_{O_2} + O_2} \frac{NH_4}{K_{NH_4} + NH_4} - \frac{V_{sed,NB}}{h} - Mort_{NB}^T \right) NB \quad (17)$$

Difference between sediments and water column

All processes presented above occur in the water column. In sediments, PPs do not grow and there is no sedimentation for any species. It is also possible to define different kinetics parameter values in water column and in sediment for bacteria, even heterotrophic or nitrifying, which was not the case in this study. Indeed (Fischer and Pusch, 2001) observed that bacteria are smaller in the pelagic zone than in sediments. (McCarter, 1999) showed that multicellular behaviour and growth is complex in organized communities and that it could differ from those of single cells.

Exchanges between water column and sediments

The exchange flux between the water column and the sediments of the i^{th} dissolved species ($\Phi_{d,i}$, $[ML^{-2}T^{-1}]$) is calculated by considering the diffusion through the limit layer (Boudreau, 1997):

$$\Phi_{d,i} = \beta(C_{s,i} - C_{w,i}) \quad (18)$$

where β is the mass transfer coefficient ($[MT^{-1}]$), $C_{s,i}$ is the concentration of the i^{th} species in sediments ($[ML^{-3}]$) and $C_{w,i}$ the concentration of the i^{th} species in the water column ($[ML^{-3}]$). In ProSE, the formulation $\beta = E_s u_*$ is

used where E_s is a fitted coefficient (without dimension and theoretically proportional to the Schmidt number), and $u_* = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}}$ is the shear velocity ($[LT^{-1}]$), where τ is the mean shear stress ($[ML^{-1}T^{-3}]$) and ρ is the water volumic mass ($[ML^{-3}]$).

At each time step and in each cell of the simulated domain, ProSE calculates a total flux of particulate exchange between the water column and the sediments (Φ_d , $[ML^{-2}T^{-1}]$), which is the sum of an erosion flux (Φ_{ero} , $[ML^{-2}T^{-1}]$) and a sedimentation flux (Φ_{sed} , $[ML^{-2}T^{-1}]$):

$$\Phi_p = \Phi_{ero} + \Phi_{sed} \quad (19)$$

For the i^{th} particulate species, the erosion flux ($\Phi_{ero,i}$, $[ML^{-2}T^{-1}]$) is calculated based on the transport capacity theory Bagnold, 1966; Yang, 1996; Prosser and Rustomji, 2000; Tayfur, 2002). A multi-species approach leads to the formulation (Maldiney, 1994):

$$\Phi_{ero,i} = \chi_i \zeta \frac{1}{\sum_j \chi_j (\rho_j - \rho_w) / \rho_j} \frac{\rho_w g J U}{g} \quad (20)$$

where χ_i is the mass fraction of the i^{th} species in sediments (without dimension), ζ is the percentage of hydraulic power used to maintain all the particles in suspension (without dimension), ρ_j the volumic mass of the j^{th} species ($[ML^{-3}]$), ρ_w the water volumic mass ($[ML^{-3}]$), g the acceleration due to gravity ($[LT^{-2}]$), J the friction slope (without dimension) and U the mean water velocity ($[LT^{-1}]$).

For the i^{th} particulate species, the sedimentation flux ($\Phi_{sed,i}$, $[ML^{-2}T^{-1}]$) is calculated based on

$$\Phi_{sed,i} = V_{sed,i} C_{w,i} \quad (21)$$

where $V_{sed,i}$ is the sedimentation velocity of the i^{th} species ($[LT^{-1}]$) and $C_{w,i}$ the concentration of the i^{th} species in the water column ($[ML^{-3}]$).

APPENDIX B: GEOSTATISTICS

Some basics of geostatistics are developed in the temporal context (1D). First, theoretical and experimental variograms are presented, then geostatistical bivariate models are summarized and finally co-kriging is tackled. For further details, one may consult (Chiles and Delfiner, 1999).

Introduction to geostatistics

A random function (RF) $Z(t)$ is stationary of order two if its expectation (probabilistic average) and its covariance exist and are invariant by translation:

$$E[Z(t)] = m \quad (22)$$

$$\begin{aligned} Cov(Z(t), Z(t + \tau)) &= E[(Z(t) - m)(Z(t + \tau) - m)] \\ &= C(|\tau|) \end{aligned} \quad (23)$$

The RF variance is then $Var(Z(t)) = E[(Z(t) - m)^2] = C(0)$.

The correlogram, the correlation coefficient between $Z(t)$ and $Z(t + \tau)$ as a function of the time interval τ , is the ratio between covariance and variance: $r(\tau) = \frac{C(\tau)}{C(0)}$. It can vary between 1 (for $\tau = 0$) and -1 . Without any periodic component, it usually decreases and tends to zero when $|\tau|$ tends to the infinite: $r(\tau) \xrightarrow{|\tau| \rightarrow \infty} 0$.

The theoretical variogram. For RF stationary of order two, the variogram and the covariance provide an equivalent description of the temporal variability; the variogram is written

$$\gamma(\tau) = C(0) - C(\tau). \quad (24)$$

For two main reasons, variograms are preferred to covariances or correlogram in geostatistics:

- it remains defined for 'intrinsic' RF, when the covariance is not stationary or not even defined. This is the case when the variogram does not stabilize around a 'sill', as for instance for the linear variogram. Thus, variogram is more general than the covariance;
- it has interesting properties for inference, i.e. its calculation from data (Chiles and Delfiner, 1999).

The experimental variogram. Practically, data are available only at experimental points; an experimental variogram is then calculated as an average of squared differences:

$$\gamma_{exp}(\tau) = \frac{1}{2 \cdot n(\tau)} \sum_{i=1}^{n(\tau)} [(Z(t_i + \tau) - Z(t_i))^2] \quad (25)$$

$n(\tau)$ designating the number of pairs of experimental instants separated from τ .

Since it is calculated on a single realization of the RF, the experimental variogram cannot be considered as a discretization of the 'theoretical' variogram of variable Z (Chiles and Delfiner, 1999). In the monovariate case, experimental simple variogram is then fitted by a function $\gamma(\tau)$ admitting the required mathematical properties. In a similar way, for a bivariate (or multivariate) case, all experimental simple and cross-variograms are fitted by a bivariate (or multivariate) model, in order to ensure consistency between simple and cross-variograms. These fitted (also called modelled) variograms are required for estimation.

Geostatistical bivariate models

Let Z_1 and Z_2 be two stationary RF of order two (StRF), and m_1 and m_2 their expectation, respectively. The couple (Z_1, Z_2) is stationary of order two if the cross-covariance is stationary:

$$\begin{aligned} Cov(Z_1(t), Z_2(t + \tau)) &= E[(Z_1(t) - m_1)(Z_2(t + \tau) - m_2)] \\ &= C_{12}(\tau). \end{aligned} \quad (26)$$

Two RF are cross-uncorrelated (i.e. they do not have any temporal cross-correlation: $Z_1 \perp Z_2$) if $C_{12}(\tau) = 0$. The cross-variogram between two RF is defined as half the covariance of their increments:

$$\gamma_{12}(\tau) = \frac{1}{2} E[(Z_1(t + \tau) - Z_1(t))(Z_2(t + \tau) - Z_2(t))]. \quad (27)$$

If Z_1 and Z_2 are cross-uncorrelated, then $\gamma(\tau) = 0$; if their cross-covariance is symmetric ($C_{12}(-\tau) = C_{12}(\tau)$), then the cross-variogram is written $\gamma_{12}(\tau) = C_{12}(0) - C_{12}(\tau)$.

The following three bivariate models present an increasing complexity. In the first model ('residual model'), simple relationships exist between two variables Z_1 and Z_2 . As this is not necessarily the case experimentally, two other bivariate models are widely used: the 'intrinsic correlation model' and the 'linear model of coregionalization'. The first two models are simplifications of the third one.

The residual model.

$$Z_2(t) = Z_1(t) + R(t) \quad (28)$$

with $Z_1 \perp R$, and γ_1 , γ_2 , and γ_R , respectively designating the simple variograms of Z_1 , Z_2 and R . Simple and cross-variograms of Z_1 and Z_2 are thus written as:

$$\begin{cases} \gamma_2(\tau) = \gamma_1(\tau) + \gamma_R(\tau) \\ \gamma_{12}(\tau) = \gamma_1(\tau) \end{cases} \quad (29)$$

In this model, the cross-variogram between Z_1 and Z_2 and the variogram of Z_1 are equal and lower than the variogram of Z_2 .

The intrinsic correlation model. Definition. Two RF Z_1 and Z_2 are in intrinsic correlation if their simple and cross-covariances are proportional to each other: $C_{ij}(\tau) = b_{ij}K(\tau)$, where K is a covariance function and $i, j = 1, 2$. To simplify, let's assume that $K(0) = 1$, $b_{11} \neq 0$ and $b_{22} \neq 0$ (a RF with nil variance is a constant).

Properties.

- The cross-covariance of two RF in intrinsic correlation is proportional to one of the simple stationary covariances, and is symmetric. Thus, $C_{12}(-\tau) = C_{12}(\tau)$ and $b_{12} = b_{21}$;
- Simple and cross-variograms also are proportional to each other:

$$\gamma_{ij}(\tau) = b_{ij}\gamma(\tau) \text{ with } \gamma(\tau) = K(0) - K(\tau); \quad (30)$$

- Since $Var(Z_1(t)) = C_{11}(0)$ and $Var(Z_2(t)) = C_{22}(0)$, then

$$b_{11} = Var(Z_1(t)) \text{ and } b_{22} = Var(Z_2(t)). \quad (31)$$

- If ρ denotes the correlation coefficient between $Z_1(t)$ and $Z_2(t)$ at the same instant t , their cross-covariance is written

$$\text{Cov}(Z_1(t), Z_2(t)) = \rho \sqrt{\text{Var}(Z_1(t)) \text{Var}(Z_2(t))}. \quad (32)$$

Thus, $b_{12} = \rho \sqrt{b_{11} b_{22}}$ and $C_{12}(\tau) = C_{12}(0)K(\tau)$.

Model. Let's consider Z_1 and Z_2 , two StRF: Equation 24 summarizes the model; demonstrations is given hereafter.

$$\forall i, j : C_{ij}(\tau) = b_{ij}K(\tau) \Leftrightarrow \exists R \mid \begin{cases} Z_1 \perp R \text{ and } C_R(\tau) = C_1(\tau) \\ Z_2(t) = \rho \omega Z_1(t) + \omega \sqrt{1 - \rho^2} R(t) \end{cases} \quad (33)$$

Let's assume that $\omega^2 = \frac{b_{22}}{b_{11}}$, with $\omega > 0$: then $\text{Var}(Z_2) = \omega^2 b_{11}$.

If $|\rho_{12}| \neq 1$, the two StRF constitute a free system: $Z_2 = \alpha Z_1 + \beta R$, where $R \perp Z_1$. Then $\text{Cov}(Z_1(t), Z_2(t)) = \alpha \text{Var}(Z_1(t))$ and $\alpha = \rho \sqrt{\frac{b_{22}}{b_{11}}} = \rho \omega$.

One can deduce that $Z_2 = \rho \omega Z_1 + \beta R$; thus the covariance of RF R is stationary and proportional to $K(\tau)$: $\beta^2 C_R(\tau) = C_2(\tau) - \rho^2 \omega^2 C_1(\tau)$.

Assuming that $\text{Var}(R) = \text{Var}(Z_1)$, $\beta^2 C_1(\tau) = \omega^2 C_1(\tau) - \rho^2 \omega^2 C_1(\tau)$, thus

$$\beta^2 = \omega^2 (1 - \rho^2) \text{ and } Z_2 = \rho \omega Z_1 + \omega \sqrt{1 - \rho^2} R, \quad (34)$$

with $R \perp Z_1$ and $C_R = C_1$.

Let's notice that if $|\rho_{12}| = 1$, Z_1 and Z_2 are linearly linked: $Z_2 = \omega Z_1 + a$.

$\Leftarrow$ If $Z_2 = \rho \omega Z_1 + \omega \sqrt{1 - \rho^2} R$ with $R \perp Z_1$ and $C_R = C_1$, then:

- R is StRF, because its temporal covariance is equal to the one of Z_1 ;
- the temporal covariance of Z_2 is $C_2 = \rho^2 \omega^2 C_1 + \omega^2 (1 - \rho^2) C_R = \omega^2 C_1$;
- the temporal cross-covariance between Z_1 and Z_2 is written

$$C_{12} = \rho \omega C_1 + \omega \sqrt{1 - \rho^2} C_{1R}. \quad (35)$$

But as $R \perp Z_1$, their temporal cross-covariance is null: $C_{1R} = 0$ and thus $C_{12} = \rho \omega C_1$.

In conclusion, given that simple and cross-covariances of Z_1 and Z_2 are proportional to each other, Z_1 and Z_2 are in intrinsic correlation.

The two coefficients ρ and ω have different meanings. The correlation coefficient ρ quantifies the linear link between the variables Z_1 and Z_2 which is maximum if $|\rho| = 1$. The 'sill ratio' ω^2 characterizes the relative

amplitude of the fluctuations of both variables. If $\omega = 1$, the simple variograms of both variables are equal.

Note that if $\rho \omega = 1$, then the intrinsic correlation model corresponds to a particular case of the residual model, with γ_R proportional to γ_1 .

The linear model of co-regionalization. It generalizes the intrinsic correlation model to several temporal components k with different correlations or different fluctuation amplitudes. In this model, the simple and cross-variograms are linear combinations of the same components $\gamma^k(\tau)$, a component present in the cross-variogram being necessarily present in both simple associated variograms. The model can be seen as a linear combination of several intrinsic correlation models, which can be written as Equation 25. Note that k describes a temporal component and not an exponent.

$$\gamma_{ij}(\tau) = \sum_k^N b_{ij}^k \gamma^k(\tau) \quad (36)$$

Estimation by co-kriging (Chiles and Delfiner, 1999)

Kriging of Z_1 at a given instant t_0 is an optimal linear estimator from experimental values $Z_1(t_\alpha)$; it is written $Z_1^*(t_0) = \sum_\alpha \lambda_{1\alpha} Z_1(t_\alpha)$.

Co-kriging consists in estimating the value of variable Z_1 at the instant t_0 thanks to the experimental values of Z_1 and to another variable Z_2 correlated to Z_1 (with for example Z_2 denser sampled than Z_1). The co-kriging of Z_1 by Z_2 at an instant t_0 is written as Equation 26.

$$Z_1^*(t_0) = \sum_{\alpha \in S_1} \lambda_{1\alpha} Z_1(t_{1\alpha}) + \sum_{\alpha \in S_2} \lambda_{2\alpha} Z_2(t_{2\alpha}) \quad (37)$$

The weights $\lambda_{1\alpha}$ and $\lambda_{2\alpha}$ are obtained by minimizing the estimation error variance under non-bias conditions. For unknown and unlinked means of Z_1 and Z_2 , this is performed via the linear system presented by Equation 27, which involves simple and cross-variograms $\gamma_{11}(\tau)$, $\gamma_{22}(\tau)$, and $\gamma_{12}(\tau)$.

$$\begin{bmatrix} \gamma_{11}(t_{1\beta} - t_{1\alpha}) & \gamma_{12}(t_{2\alpha} - t_{1\alpha}) & 1 & 0 \\ \gamma_{21}(t_{1\alpha} - t_{2\alpha}) & \gamma_{22}(t_{2\beta} - t_{2\alpha}) & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \lambda_{1\alpha} \\ \lambda_{2\alpha} \\ \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_{11}(t_0 - t_{1\alpha}) \\ \gamma_{21}(t_0 - t_{2\alpha}) \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (38)$$

Co-kriging is an exact interpolator, i.e. it goes through the experimental points $Z_1(t_{1\alpha})$: $Z_1^*(t_{1\alpha}) = Z_1(t_{1\alpha})$.

Bibliographie

- Abbott, M., Bathurst, J., Cunge, J., O'Connell, P., Rasmussen, J., 1986a. An introduction to the European Hydrological System. 1. History and philosophy of a physically based distributed modelling system. JH 87, 45–59.
- Abbott, M., Bathurst, J., Cunge, J., O'Connell, P., Rasmussen, J., 1986b. An introduction to the European Hydrological system. 2. Structure of a physically based distributed modelling system. JH 87, 61–77.
- Abedini, M., Nasser, M., Ansari, A., 2008. Cluster-based ordinary kriging of piezometric head in west texas/new mexico - testing of hypothesis. JH 351 (3-4), 360–367.
- Abi-Zeid, I., Bobée, B., 1999. The stochastic modeling of low-flows : a literature review. Rev. Sci. Eau 12 (3), 459–484.
- Abrahart, R., Kneale, P., See, L., 2004. Neural Networks for hydrological modelling. A.A. Balkema Publishers.
- Abu-El-Sha's, W., Rihani, J., 2007. Application of the high performance computing techniques of parflow simulator to model groundwater flow at Azraq basin. Water Resour. Manage. 21, 409–425.
- Ackerer, P., Delay, F., 2010. Inversion of a set of well-test interferences in a fractured limestone aquifer by using an automatic downscaling parameterization technique. J. Hydrol. 389, 42–56.
- Adams, R., Parkin, G., Rutherford, J., Ibbitt, R., Elliott, A., 2005. Using a rainfall simulator and a physically based hydrological model to investigate runoff processes in a hillslope. Hydrological Processes 19, 2209–2223.
- AESN, 1974. Les bassins de la Seine et des cours d'eau Normands - Eaux souterraines. Vol. Agence de l'eau Seine-Normandie, Nanterre, tome 1, fasc. 4.
- AESN, 2006. Cartographie des zones à dominante humide. Tech. rep., AESN.
- Ahmadi, S., Sedghamiz, A., 2007. Geostatistical analysis of spatial and temporal variations of groundwater level. Environ. Monit. Assess. 129, 277–294.
- Ahmadi, S., Sedghamiz, A., 2008. Application and evaluation of kriging and cokriging methods on groundwater depth mapping. Environ. Monit. Assess. 138 (1), 357–368.
- Ahmed, S., de Marsily, G., 1993. Cokriged estimation of aquifer transmissivity as an indirect solution of the inverse problem : A practical approach. Water Resour. Res. 29(2), 521–530.
- Alcolea, A., Carrera, J., Medina, A., 2006. Pilot points method incorporating prior information for solving the groundwater flow inverse problem. Advances in Water Resources 29 (11), 1678 – 1689.
- Alexander, M., Berg, S., Illman, W., 2011. Field study of hydrogeologic characterization methods in a heterogeneous aquifer. Ground Water 49 (3), 365–382.
- Almasri, M., 2007. Nitrate contamination of groundwater : A conceptual management framework. Environmental Impact Assessment Review 27, 220–242.
- Alsdorf, D., Rodríguez, E., Lettermaier, D., 2007. Measuring surface water from space. Rev. Geophys. 45, RG2002.

- Ambroise, B., 1999. Genèse des débits dans les petits bassins versants ruraux en milieu tempéré : 2- modélisation systémique et dynamique. *Revue des Sciences de l'Eau* 12, 123–153.
- Ambrose, R., Barnwell, T., McCutcheon, S., Williams, J., 1996. *Water Resources Handbook*. McGraw-Hill, New York, Ch. Chapter 14 : Computer models for water quality analysis.
- Ambrose, R. B., Wool, T. A., Wool, J. P., Schanz, R. W., 1988. WASP4, A hydrodynamic and water quality model. Model theory, user's manual guide and programmer's guide. US Environmental Protection Agency.
- Andersen, J., Refsgaard, J., Jensen, K., 2001. Distributed hydrological modelling of the Senegal River Basin - model construction and validation. *J. Hydrol.* 247, 200–214.
- Andersen, M., Acworth, R., 2009. Stream-aquifer interactions in the Maules Creek catchment, Namoi Valley, New South Wales, Australia. *Hydrogeology Journal* 17, 2005–2021.
- Anderson, M. P., 2005. Heat as a ground water tracer. *Ground Water* 43, 951–968.
- Anderton, S., Latron, J., Gallart, F., 2002a. Sensitivity analysis and multi-response, multi-criteria evaluation of a physically based distributed model. *Hydrological Processes* 16, 333–353.
- Anderton, S., Latron, J., White, S., Llorens, P., Gallart, F., Salvany, C., O'Connell, P., 2002b. Internal evaluation of a physically based distributed model using data from a Mediterranean mountain catchment. *EGS* 6 (1), 67–83.
- Angermann, L., Krause, S., Lewandowski, J., 2012. Application of heat pulse injections for investigating shallow hyporheic flow in a lowland river. *Water Resour. Res.* 48 (10).
- Angier, J., McCarty, G., Prestegard, K., 2005. Hydrology of a first-order riparian zone and stream, mid-atlantic coastal plain, Maryland. *J. Hydrol.* 309, 149–166.
- Anibas, C., Buis, K., Verhoeven, R., Meire, P., Batelaan, O., 2011. A simple thermal mapping method for seasonal spatial patterns of groundwater-surface water interaction. *J. Hydrol.* 397 (1-2), 93–104.
- Anibas, C., Fleckenstein, J., Volze, N., Buis, K., Verhoeven, R., Meire, P., Batelaan, O., 2009. Transient or steady-state? using vertical temperature profiles to quantify groundwater-surface water exchange. *Hydrological Processes* 23, 2165–2177.
- Anibas, C., Verbeiren, B., Buis, K., Chormański, J., De Doncker, L., Okruszko, T., Meire, P., Batelaan, O., 2012. A hierarchical approach on groundwater-surface water interaction in wetlands along the upper Biebrza River, Poland. *Hydrology and Earth System Sciences* 16 (7), 2329–2346.
- Aral, M., Gunduz, O., 2003. Scale effects in large scale watershed modeling. In : Singh, V., Yadava, R. (Eds.), *International Conference on Water and Environment*. Allied Publishers, India, pp. 37–51.
- Aral, M., Gunduz, O., 2006. *Watershed Models*. Taylor & Francis, Ch. Large-Scale Hybrid Watershed Modeling, pp. 75–95.
- Arheimer, B., Olsson, J., 2003. Integration and coupling of hydrological models with water quality models : Applications in Europe. Tech. rep., Workgroup Report, WMO RA VI (K55.1.02).
- Arhonditsis, G., Brett, M., 2004. Evaluation of the current state of mechanistic aquatic biogeochemical modeling. *Mar. Ecol. Prog. Ser.* 271, 13–26.
- Atchley, A., Maxwell, R., 2011. Influences of subsurface heterogeneity and vegetation cover on soil moisture, surface temperature and evapotranspiration at hillslope scales. *Hydrogeology Journal* 19, 289–305.
- Ayvaz, M. T., Karahan, H., Aral, M. M., 2007. Aquifer parameter and zone structure estimation using kernel-based fuzzy c-means clustering and genetic algorithm. *J. Hydrol.* 343, 240–253.
- Bagnold, R., 1966. *An Approach to the Sediment Transport Problem from General Physics*. Physiographic and Hydraulic Studies of Rivers. Geological Survey professional paper 422-I.

- Bardini, L., Boano, F., Cardenas, M., Revelli, R., Ridolfi, L., 2012. Nutrient cycling in bedform induced hyporheic zones. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 84, 47–61.
- Barnwell, T., Brown, L., Whittemore, R., 1987. *Systems Analysis in Water Quality Management*. Pergamon Press New York, Ch. QUAL2E - A Case Study in Water Quality Modelling Software, pp. 377–387.
- Barron, O., Barr, A., Donn, M., 2013. Effect of urbanisation on the water balance of a catchment with shallow groundwater. *J. Hydrol.* 485, 162–176.
- Bathurst, J., Birkinshaw, S., Cisneros, F., Fallas, J., Iroumé, A., Iturraspe, R., no Novillo, M. G., Urciuolo, A., Alvarado, A., Coello, C., Huber, A., Miranda, M., Ramirez, M., Sarandón, R., 2011. Forest impact on floods due to extreme rainfall and snowmelt in four Latin American environments 2 : Model analysis. *J. Hydrol.* 400, 292–304.
- Bathurst, J., Burton, A., Clarke, B., Gallart, F., 2006. Application of the SHETRAN basin-scale, landslide sediment yield model to the Llobregat basin, Spanish Pyrenees. *Hydrological Processes* 20, 3119–3138.
- Bathurst, J., Sheffield, J., Leng, X., Quaranta, G., 2003. Decision support system for desertification mitigation in the Agri basin, southern Italy. *Physics and Chemistry of the Earth* 28, 579–587.
- Bathurst, J. C., Ewen, J., Parkin, G., O'Connell, P. E., Cooper, J., 2004. Validation of catchment models for predicting land-use and climate change impacts. 3. Blind validation for internal and outlet responses. *J. Hydrol.* 287, 74–94.
- Bauer, P., Gumbricht, T., Kinzelbach, W., 2006. A regional coupled surface water/groundwater model of the Okavango Delta, Botswana. *Water Resour. Res.* 42, W04403.
- Baxter, C., Hauer, F., Woessner, W., 2003. Measuring Groundwater-Stream Water Exchange : New Techniques for Installing Minipiezometers and Estimating Hydraulic Conductivity. *Transactions of the American Fisheries Society* 132, 493–502.
- Baxter, C., Hauer, F. R., 2000. Geomorphology, hyporheic exchange, and selection of spawning habitat by bull trout (*salvelinus confluentus*). *Canadian Journal of Fisheries and Aquatic Sciences* 57-7, 1470–1481.
- Beaujouan, V., Durand, P., Ruiz, L., 2001. Modelling the effect of the spatial distribution of agricultural practices on nitrogen fluxes in rural catchments. *Ecol. Model.* 137, 93–105.
- Becker, M., Georgian, T., Ambrose, H., Siniscalchi, J., Fredrick, K., 2004. Estimating flow and flux of ground water discharge using water temperature and velocity. *J. Hydrol.* 296 (1-4), 221 – 233.
- Bencala, K., Gooseff, M., Kimball, B., 2011. Rethinking hyporheic flow and transient storage to advance understanding of stream-catchment connections. *Water Resour. Res.* 47, W00H03.
- Bendjoudi, H., Weng, P., Guérin, R., Pastre, J., 2002. Riparian wetlands of the middle reach of the Seine river (France) : historical development, investigation and present hydrologic functioning. A case study. *J. Hydrol.* 263, 131–155.
- Bertrand, G., Goldscheider, N., Gobat, J.-M., Hunkeler, D., 2012. Review : From multi-scale conceptualization to a classification system for inland groundwater-dependent ecosystems. *Hydrogeology Journal* 20, 5–25.
- Besbes, M., 1978. L'estimation des apports aux nappes souterraines. un modèle régional d'infiltration efficace. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
- Beven, K., 1989. Changing ideas in hydrology. The case of physically-based model. *J. Hydrol.* 105, 157–172.
- Beven, K., 1993. Prophecy, reality and uncertainty in distributed hydrological modelling. *Advances in Water Resources* 16, 41–51.
- Beven, K., 2006a. A manifesto for the equifinality thesis. *J. Hydrol.* 320, 18–36.
- Beven, K., 2006b. On undermining science ? *Hydrological Processes* 20, 3141–3146.

- Beven, K., Cloke, H., 2012. Comment on "Hyperresolution global land surface modeling : Meeting a grand challenge for monitoring earth's terrestrial water" by Eric F. Wood et al. *Water Resour. Res.* 48, W01801.
- Beven, K., Freer, J., 2001. A dynamic TOPMODEL. *Hydrological Processes* 15, 1993–2011.
- Beven, K., Kirby, M., 1979. A physically based variable contributed area model of bassin hydrology. *Hydrological Sciences Bulletin* 24 (1), 43–69.
- Beven, K., Smith, P., Wood, A., 2011. On the colour and spin of epistemic error (and what we might do about it). *Hydrology and Earth System Sciences* 15, 3123–3133.
- Beven, K., Westerberg, I., 2011. On red herrings and real herrings : disinformation and information in hydrological inference. *Hydrological Processes* 25, 1676–1680.
- Beville, S., Mirus, B., Ebel, B., Malder, G., Loague, K., 2010. Using simulated hydrologic response to revisit the 1973 Lerida Court landslide. *Environ. Earth. Sci.* 61, 1249–1257.
- Biancamaria, S., Rodríguez, E., Mognard, N., Saleh, F., Habets, F., Flipo, N., 2012. Présentation de la future mission satellitaire SWOT et des campagnes aéroportées AirSWOT. Tech. rep., PIREN Seine.
- Biggs, B., Close, M., 1989. Periphyton biomass in gravel bed rivers : the relative effects of flows and nutrients. *Freshwater Biology* 22, 209–231.
- Billen, G., Beusen, A., Bouwman, L., Garnier, J., 2010. Anthropogenic nitrogen autotrophy and heterotrophy of the world's watersheds : Past, present, and future trends. *Global Biogeochem. Cycles* 24, GB0A11.
- Billen, G., Garnier, J., 2000. Nitrogen transfers through the Seine drainage network : a budget based on the application of 'Riverstrahler' model. *Hydrobiologia* 410, 139–150.
- Billen, G., Garnier, J., Deligne, C., Billen, C., 1999. Estimates of early-industrial inputs of nutrients to river systems : implication for coastal eutrophication. *Sci. Total Environ.* 243/244, 43–52.
- Billen, G., Garnier, J., Ficht, A., Cun, C., 2001. Modeling the response of water quality in the Seine River estuary to human activity in its watershed over the last 50 years. *Estuaries* 24 (6B), 977–993.
- Billen, G., Garnier, J., Hanset, P., 1994. Modelling phytoplankton development in whole drainage networks : The RIVERSTRAHLER model applied to the Seine river system. *Hydrobiologia* 289, 119–137.
- Billen, G., Garnier, J., Mouchel, J.-M., Silvestre, M., 2007a. The Seine system : Introduction to a multidisciplinary approach of the functioning of a regional river system. *Sci. Total Environ.* 375, 1–12.
- Billen, G., Garnier, J., Némery, J., Sebilo, M., Sferratore, A., Barles, S., Benoit, P., Benoît, M., 2007b. A long-term view of nutrient transfers through the Seine River continuum. *Sci. Total Environ.* 375, 80–97.
- Billen, G., Garnier, J., Rousseau, V., 2005. Nutrient fluxes and water quality in the drainage network of the Scheldt basin over the last 50 year. *Hydrobiologia* 540 (1-3), 47–67.
- Billen, G., Garnier, J., Thieu, V., Silvestre, M., Barles, S., Chatzimpiros, P., 2012. Localising the nitrogen imprint of the Paris food supply : the potential of organic farming and changes in human diet. *Biogeosciences* 9, 607–616.
- Billen, G., Servais, P., Brion, N., Garnier, J., Ficht, A., 1997. Bilans d'oxygène et de carbone dans l'estuaire amont de la Seine. Tech. rep., Seine Aval.
- Billen, G., Thieu, V., Garnier, J., Silvestre, M., 2009. Modelling the N cascade in regional watersheds : The case study of the Seine, Somme and Scheldt rivers. *Agriculture, Ecosystems and Environment* 133, 234–246.
- Birkinshaw, S., 2008. Physically-based modelling of double-peak discharge responses at Slapton Wood catchment. *Hydrological Processes* 22, 1419–1430.
- Birkinshaw, S., Bathurst, J., 2006. Model study of the relationship between sediment yield and river basin area. *Earth Surface Processes and Landforms* 31, 750–761.

- Birkinshaw, S. J., Webb, B., 2010. Flow pathways in the Slapton Wood catchment using temperature as a tracer. *J. Hydrol.* 383 (3-4), 269–279.
- Bitteli, M., Tomei, F., Pistocchi, A., Flury, M., Boll, J., Brooks, E., Antolini, G., 2010. Development and testing of a physically based, three-dimensional model of surface and subsurface hydrology. *Advances in Water Resources* 33, 106–122.
- Bixio, A., Gambolati, G., Paniconi, C., Putti, M., Shestopalov, V., Bublias, V., Bohuslavsky, A., Kasteltseva, N., Rudenko, Y., 2002. Modeling groundwater-surface water interactions including effects of morphogenetic depressions in the Chernobyl exclusion zone. *Environ. Geol.* 42, 162–177.
- Blasone, R.-S., Madsen, H., Rosbjerg, D., 2008. Uncertainty assessment of integrated distributed hydrological models using GLUE with Markov chain Monte Carlo sampling. *J. Hydrol.* 353, 18–32.
- Blöschl, G., Sivapalan, M., 1995. Scale issues in hydrological modelling : A review. *Hydrological Processes* 9, 251–290.
- Boano, F., Camporeale, C., Revelli, R., 2010. A linear model for coupled surface-subsurface flow in meandering stream. *Water Resour. Res.* 46, W07535.
- Boano, F., Revelli, R., Ridolfi, L., 2009. Quantifying the impact of groundwater discharge on the surface-subsurface exchange. *Hydrological Processes* 23, 2108–2116.
- Boesten, J., 2000. Modeller subjectivity in estimating pesticide parameters for leaching models using the same laboratory data set. *Agricultural Water Management* 44 (1-3), 389–409.
- Boët, P., Akopian, M., Belliard, J., dit Thomas, R. B., Pourriot, R., Talès, E., Testard, P., 1998. La Seine en son bassin. Fonctionnement écologique d'un système fluvial anthropisé. Elsevier, Ch. Une faune aquatique sous pressions multiples, pp. 627–678.
- Boezio, M., Costa, J., Koppe, J., 2006. Accounting for extensive secondary information to improve watertable mapping. *Natural Resources Research* 15 (1), 33–48.
- Boronina, A., Renard, P., Balderer, W., Christodoulides, A., 2003. Groundwater resources in the Kouris catchment (Cyprus) : data analysis and numerical modelling. *J. Hydrol.* 271, 130–149.
- Boudreau, B. P., 1997. *Diagenetic Models and their Implementation*. Springer.
- Boukema, B., 1987. Modélisation des écoulements superficiels et souterrains dans le sud-ouest de la France : approche du bilan hydrique. Ph.D. thesis, ENSMP.
- Boulton, A., 2007. Hyporheic rehabilitation in rivers : restoring vertical connectivity. *Freshwater Biology* 52 (4), 632–650.
- Boulton, A. J., Findlay, S., Marmonier, P., Stanley, E. H., Valett, H. M., 1998. The functional significance of the hyporheic zone in streams and rivers. *New York*, 59–81.
- Bouraoui, F., Grizzetti, B., 2008. An integrated modelling framework to estimate the fate of nutrients : Application to the Loire (France). *Ecol. Model.* 212, 450–459.
- Bouraoui, F., Grizzetti, B., 2011. Long term change of nutrient concentrations of rivers discharging in European seas. *Sci. Total Environ.* 409, 4899–4916.
- Bovolo, C., Abele, S., Bathurst, J., Caballero, D., Ciglan, M., Eftichidis, G., Simo, B., 2009. A distributed framework for multi-risk assessment of natural hazards used to model the effects of forest fire on hydrology and sediment yield. *Computers and Geosciences* 35, 924–945.
- Boyer, E., Goodale, C., Jaworski, N., Howarth, R., 2002. Anthropogenic nitrogen sources and relationships to riverine nitrogen export in the northeastern U.S.A. *Biogeochemistry* 57/58, 137–169.
- Boyle, D., Gupta, H.V., S., 2000. Toward improved calibration of hydrologic models : Combining the strengths of manual and automatic methods. *Water Resour. Res.* 36 (12), 3663–3674.

- Bradley, C., 2002. Simulation of the annual water table dynamics of a floodplain wetland, Narborough Bog, UK. *J. Hydrol.* 261, 150–172.
- Briggs, M., Lautz, L., McKenzie, J., 2012. A comparison of fibre-optic distributed temperature sensing to traditional methods of evaluating groundwater inflow to streams. *Hydrological Processes* 26 (9), 1277–1290.
- Brisson, N., Mary, B., Ripoche, D., Jeuffroy, M., Ruget, F., Nicoullaud, B., Gate, P., Devienne-Barret, F., Antonioletti, R., Durr, C., Richard, G., Beaudoin, N., Recous, S., Tayot, X., Plenet, D., Cellier, P., Machet, J., Meynard, J., Delécolle, R., 1998. Stics : a generic model for the simulation of crops and their water and nitrogen balances. 1- theory and parametrization applied to wheat and corn. *Agronomie* 18, 311–346.
- Brochu, Y., Marcotte, D., 2003. A simple approach to account for radial flow and boundary conditions when kriging hydraulic head fields for confined aquifers. *Mathematical Geology* 35 (2), 111–139.
- Brookfield, A., Sudicky, E., Park, Y.-J., Conant, B., 2009. Thermal transport modelling in a fully integrated surface/subsurface framework. *Hydrological Processes* 23, 2150–2164.
- Brown, L. C., Barnwell, T. O., 1987. Enhanced stream water quality models, QUAL2E and QUAL2E UNCAS - Documentation and user's TechReport. US EPA.
- Brunke, M., Gonser, T., 1997. The ecological significance of exchange processes between rivers and groundwater. *Freshwater Biology* 37 (1), 1–33.
- Brunner, P., Cook, P., Simmons, C., 2009a. Hydrogeologic controls on disconnection between surface water and groundwater. *Water Resour. Res.* 45, W01422.
- Brunner, P., Simmons, C., Cook, P., 2009b. Spatial and temporal aspects of the transition from connection to disconnection between rivers, lakes and groundwater. *J. Hydrol.* 376, 159–169.
- Brunner, P., Simmons, C., Cook, P., Therrien, R., 2010. Modeling surface water-groundwater interaction with MODFLOW : Some considerations. *Ground Water* 48 (2), 174–180.
- Buchanan, S., Triantafyllis, J., 2009. Mapping water table depth using geophysical and environmental variables. *Ground Water* 47 (1), 80–96.
- Burke, M., Oleson, K., McCullough, E., Gaskell, J., 2009. A global model tracking water, nitrogen, and land inputs and virtual transfers from industrialized meat production and trade. *Environ. Model. Assess.* 14, 179–193.
- Burns, D., 1998. Retention of NO_3^- in an upland stream environment : A mass balance approach. *Biogeochemistry* 40, 73–96.
- Burt, T., 2005. A third paradox in catchment hydrology and biogeochemistry : decoupling in the riparian zone. *Hydrological Processes* 19, 2087–2089.
- Burt, T., Pinay, G., Matheson, F., Haycock, N., Butturini, A., Clement, J., Danielescu, S., Dowrick, D., Hefting, M., Hillbricht-Ilkowska, A., Maitre, V., 2002. Water table fluctuations in the riparian zone : comparative results from a pan-European experiment. *J. Hydrol.* 265, 129–148.
- Burton, A., Bathurst, J., 1998. Physically based modelling of shallow landslide sediment yield at a catchment scale. *Environ. Geol.* 35 (2-3), 89–100.
- Butts, M., Payne, J., Kristensen, M., Madsen, H., 2004. An evaluation of the impact of model structure on hydrological modelling uncertainty for streamflow simulation. *J. Hydrol.* 298, 242–266.
- Caissie, D., Pollock, T., Cunjak, R., 1996. Variation in stream water chemistry and hydrograph separation in a small drainage basin. *J. Hydrol.* 178, 137–157.
- Calligee, 2004. Réalisation de la carte piézométrique de la nappe de Beauce du Val de Loire et de Sologne en période de hautes eaux. Rapport Gest'eau 04-45180, AELB, 24 p., 5 fig., ann.

- Calver, A., 2001. Riverbed permeabilities : Information from pooled data. *Ground Water* 39 (4), 546–553.
- Calvet, R., 1989. Adsorption of organic chemicals in soils. *Environmental Health Perspectives* 83, 145–177.
- Camporese, M., Paniconi, C., Putti, M., Orlandini, S., 2010. Surface-subsurface flow modeling with path-based runoff routing, boundary condition-based coupling, and assimilation of multisource observation data. *Water Resour. Res.* 46, W02512.
- Camporese, M., Paniconi, C., Putti, M., Salandin, P., 2009. Ensemble kalman filter data assimilation for a process-based catchment scale model of surface and subsurface flow. *Water Resour. Res.* 45, W10421.
- Canipelle, A., 1964. Géologie du bassin versant de l'Orgeval (affluent du Grand Morin - région de Coulommiers S. et M.). Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie.
- Capilla, J., Gomez-Hernandez, J., Sahuquillo, A., 1997. Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data. 2. Demonstration on a synthetic aquifer. *J. Hydrol.* 203, 175–188.
- Cardenas, M., 2009a. A model for lateral hyporheic flow based on valley slope and channel sinuosity. *Water Resour. Res.* 45, W01501.
- Cardenas, M., 2009b. Stream-aquifer interactions and hyporheic exchange in gaining and losing sinuous streams. *Water Resour. Res.* 45, W06469.
- Cardenas, M., Wilson, J., 2007a. Dunes, turbulent eddies, and interfacial exchange with permeable sediments. *Water Resour. Res.* 43, W08412.
- Cardenas, M., Wilson, J., 2007b. Exchange across a sediment-water interface with ambient groundwater discharge. *J. Hydrol.* 346, 69–80.
- Cardenas, M., Wilson, J., 2007c. Hydrodynamics of coupled flow above and below a sediment-water interface with triangular bedforms. *Advances in Water Resources* 30, 301–313.
- Cardenas, M., Wilson, J., Zlotnik, V., 2004. Impact of heterogeneity, bed forms, and stream curvature on subchannel hyporheic exchange. *Water Resour. Res.* 40, W08307.
- Carleton, J., Montas, H., 2010. An analysis of performance models for free water surface wetlands. *Water Research* 44, 3595–3606.
- Carlier, N., de Marsily, G., 2004. Assessment and modelling of the influence of man-made networks on the hydrology of a small watershed : implications for fast flow components, water quality and landscape management. *J. Hydrol.* 285, 76–95.
- Carrera, J., Alcolea, A., Medina, A., Hidalgo, J., Slooten, L. J., 2005. Inverse problem in hydrogeology. *Hydrogeology Journal* 13, 206–22.
- Carrera, J., Neuman, S., 1986. Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions : 3. application to synthetic and field data. *Water Resour. Res.* 22 (2), 228–242.
- Casper, A., Dixon, B., Steimle, E., Hall, M., Conmy, R., 2012. Scales of heterogeneity of water quality in rivers : Insights from high resolution maps based on integrated geospatial, sensor and ROV technologies. *Applied Geography* 32, 455–464.
- Casper, M. C., Vohland, M., 2008. Validation of a large scale hydrological model with data fields retrieved from reflective and thermal optical remote sensing data - A case study for the Upper Rhine Valley. *Physics and Chemistry of the Earth* 33, 1061–1067.
- Celik, I., Rodi, W., 1991. Suspended sediment-transport capacity for open-channel flow. *J. Hyd. Eng.* 117 (2), 191–204.
- Celikyilmaz, A., Turksen, I., 2009a. Fuzzy sets and systems. In : Celikyilmaz, A., Turksen, I. (Eds.), *Modeling Uncertainties with Fuzzy Logic*. Vol. 240 of *Studies in fuzziness and soft computing*. Springer, Ch. 2.

- Celikyilmaz, A., Turksen, I., 2009b. Fuzzy sets and systems. In : Celikyilmaz, A., Turksen, I. (Eds.), *Fuzzy Functions Approach*. Vol. 240 of *Studies in fuzziness and soft computing*. Springer, Ch. 2.
- Chapagain, A., Hoekstra, A., Savenije, H., 2006. Water saving through international trade of agricultural products. *Hydrology and Earth System Sciences* 10, 455–468.
- Chauvet, P., 1999. Aide-mémoire de géostatistique linéaire. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Chen, D., MacQuarrie, K., 2004. Numerical simulation of organic carbon, nitrate, and nitrogen isotope behavior during denitrification in a riparian zone. *J. Hydrol.* 293, 235–254.
- Chen, X., Chen, X., 2003. Sensitivity analysis and determination of streambed leakance and aquifer hydraulic properties. *J. Hydrol.* 284, 270–284.
- Chilès, J., Séguret, S., Riboud, P.-M., 2008. Geostatistical analysis of validation data of an air pollution simulator. In : *Proceedings of GEOSTATS 2008*.
- Chilès, J.-P., Delfiner, P., 1999. *Geostatistics : modeling spatial uncertainty*. Wiley, New-York.
- Chow, V. T., 1959. *Open Channel Hydraulics*. McGraw Hill Company Inc., New York.
- Christiaens, K., Vanclooster, M., Mallants, D., Xevi, E., Feyen, J., 1995. Modelling of the water and nutrient cycle at the catchment scale using the european hydrological system SHE 2 : Nitrogen balance. *Water* 81, 98.
- Cinnirella, S., Buttafuoco, G., Pirrone, N., 2005. Stochastic analysis to assess the spatial distribution of ground-water nitrate concentrations in the Po catchment. *Environ. Pollut.* 133, 569–580.
- Claret, C., Marmonier, P., Bravard, J.-P., 1998. Seasonal dynamics of nutrient and biofilm in interstitial habitats of two contrasting riffles in a regulated large river. *Aquat. Sci.* 60, 33–55.
- Claret, C., Marmonier, P., Dole-Olivier, M.-J., Castella, E., 1999. Effects of management works on the interstitial fauna of floodplain aquatic systems (River Rhône, France). *Biodiversity and Conservation* 8, 1179–1204.
- Clément, J.-C., Aquilina, L., Bour, O., Plaine, K., Burt, T., Pinay, G., 2003. Hydrological flowpaths and nitrate removal rates within a riparian floodplain along a fourth-order stream in Brittany (France). *Hydrological Processes* 17, 1177–1195.
- Conan, C., Bouraoui, F., Turpin, N., de Marsily, G., Bidoglio, G., 2003. Modeling flow and nitrate fate at catchment scale in Brittany (France). *J. Environ. Qual.* 32, 2026–2032.
- Conant, B., 2004. Delineating and quantifying ground water discharge zones using streambed temperatures. *Ground Water* 42 (2), 243–257.
- Constantz, J., 2008. Heat as a tracer to determine streambed water exchanges. *Water Resour. Res.* 44, 1–20.
- Constantz, J., Stewart, A., Niswonger, R., Sarma, L., 2002. Analysis of temperature profiles for investigating stream losses beneath ephemeral channels. *Water Resour. Res.* 38-12, 1316.
- Cooley, R., 1985. A comparison of several methods of solving nonlinear regression groundwater flow problems. *Water Resour. Res.* 21 (10), 1525–1538.
- Cooley, R., Hill, M., 2000. Comment on RamaRao et al. [1995] and LaVenue et al. [1995]. *Water Resour. Res.* 36 (9), 2795–2797.
- Cooley, R., Konikow, L., Naff, R., 1986. Nonlinear-regression groundwater flow modeling of a deep regional aquifer system. *Water Resour. Res.* 22 (13), 1759–1778.
- Cooper, D., 2004. Some effects of sampling design on water quality estimation in streams. *Hydrological Sciences Journal* 49 (6), 1055–1080.

- Cotner, J., Wetzel, R., 1992. Uptake of dissolved inorganic and organic phosphorus compounds by phytoplankton and bacterioplankton. *Limnol. Oceanogr.* 37 (2), 232–243.
- Cox, M., G.W.Su, Constantz, J., 2007. Heat, chloride, and specific conductance as ground water tracers near streams. *Ground Water* 45, 187–195.
- Crabtree, R., Gent, R., Clifforde, I., 1994. Controlling pollution from combined sewer overflows : Practical experience of applying an integrated approach in the UK. *Genie-Urbain-Genie Rural* 5, 269–272.
- Cressie, N., 1990. The Origins of Kriging. *Mathematical Geology* 22 (3), 239–252.
- Cressie, N., Hawkins, D. M., 1980. Robust Estimation of the Variogram : I. *Mathematical Geology* 12 (2), 115–125.
- Cristea, N., Burges, S., 2009. Use of thermal infrared imagery to complement monitoring and modeling of spatial stream temperatures. *Journal of Hydrologic Engineering* 14 (10), 1080–1090.
- Cugier, P., Billen, G., Guillaud, J., Garnier, J., Ménesguen, A., 2005. Modelling the eutrophication of the Seine Bight (France) under historical, present and future riverine nutrient loading. *J. Hydrol.* 304, 381–396.
- Cunge, J., 1986. Simulation des écoulements non permanents dans les rivières et canaux. Tech. rep., Institut National Polytechnique de Grenoble.
- Cunge, J., Holly, F., Verwey, A., 1980. Practical aspects of computational river hydraulics. Editions Pitman advanced publishing program.
- Curie, F., Ducharne, A., Bendjoudi, H., Billen, G., 2011. Spatialization of denitrification by river corridors in regional-scale watersheds : Case study of the Seine river basin. *Physics and Chemistry of the Earth* 36, 530–538.
- Curie, F., Ducharne, A., Sebilo, M., Bendjoudi, H., 2009. Denitrification in a hyporheic riparian zone controlled by river regulation in the Seine river basin (France). *Hydrological Processes* 23, 655–664.
- Cuthbert, M., Mackay, R., Durand, V., Aller, M., Greswell, R., Rivett, M., 2010. Impacts of river-bed gas on the hydraulic and thermal dynamics of the hyporheic zone. *Advances in Water Resources* 33 (11), 1347–1358.
- Dacharry, M., 1993. Encyclopedie. AXIS.
- Dagan, G., 1985. Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities : The inverse problem. *Water Resour. Res.* 21 (1), 65–72.
- Dahl, M., Nilsson, B., Langhoff, J., Refsgaard, J., 2007. Review of classification systems and new multi-scale typology of groundwater-surface water interaction. *J. Hydrol.* 344 (1-2), 1–16.
- Dahm, C., Baker, M., Moore, D., Thibault, J., 2003. Coupled biogeochemical and hydrological responses of streams and rivers to drought. *Freshwater Biology* 48 (7), 1219–1231.
- Dahm, C., Grimm, N., Marmonier, P., Valett, H., Vervier, P., 1998. Nutrient dynamics at the interface between surface waters and groundwaters. *Freshwater Biology* 40 (3), 427–451.
- Darracq, A., Destouni, G., 2007. Physical versus biogeochemical interpretations of nitrogen and phosphorus attenuation in streams and its dependence on stream characteristics. *Global Biogeochem. Cycles* 21, GB3003.
- Darracq, A., Lindgren, G., Destouni, G., 2008. Long-term development of phosphorus and nitrogen loads through the subsurface and surface water systems of drainage basins. *Global Biogeochem. Cycles* 22, GB3022.
- Datry, T., Dole-Olivier, M., Marmonier, P., Claret, C., Perrin, J., Lafont, M., Breil, P., 2008. La zone hyporhéique, une composante à ne pas négliger dans l'état des lieux et la restauration des cours d'eau. *Ingénieries - E A T* 54, 3–18.
- David, C., Habets, F., Maidment, D., Yang, Z.-L., 2011. RAPID applied to the SIM-France model. *Hydrological Processes* 25 (22), 3412–3425.

- Davis, B., 1987. Uses and Abuses of Cross-Validation in Geostatistics. *Mathematical Geology* 19 (3), 241–248.
- Dawson, C., 2008. A continuous/discontinuous Galerkin framework for modeling coupled subsurface and surface water flow. *Computers and Geosciences* 12, 451–472.
- de Fouquet, C., 2006. La modélisation géostatistique des milieux anthropisés. Académie de Paris, Université Pierre et Marie Curie, mémoire des Sciences de la Terre.
- de Fouquet, C., 2012. Environmental Statistics Revisited : Is the Mean Reliable? *Environ. Sci. Technol.* 46, 1964–1970.
- de Fouquet, C., Flipo, N., Létinois, L., Malherbe, L., Polus-Lefebvre, E., Poulin, M., Ung, A., 2012. Which relation between deterministic simulations and observations ? In : Ninth International Geostatistics Congress, Oslo, Norway, June 11-15, 2012.
- de Fouquet, C., Gallois, D., Perron, G., 2007. Geostatistical characterization of the nitrogen dioxide concentration in an urban area. Part I : spatial variability and cartography of the annual concentration. *Atmospheric Environment* 41 (32), 6701–6714.
- de Fouquet, C., Malherbe, L., Ung, A., 2011. Geostatistical analysis of the temporal variability of ozone concentrations. comparison between CHIMERE model and surface observations. *Atmospheric Environment* 45 (20), 3434–3446.
- de Marsily, G., 1978. De l'identification des systèmes hydrogéologiques. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
- de Marsily, G., 1994. Quelques réflexions sur l'utilisation des modèles en hydrologie. *Revue des Sciences de l'Eau* 7, 219–234.
- de Marsily, G., 1995. L'eau. "Dominos", Flammarion.
- de Marsily, G., 2006. Les eaux continentales. Tech. rep., Institut de France - Académie des Sciences.
- de Marsily, G., 2008. Eau, changements climatiques, alimentation et évolution démographique. *Revue des Sciences de l'Eau/Journal of Water Science* 21 (2), 111–128.
- de Marsily, G., Delhomme, J.-P., Delay, F., Buoro, A., 1999. Regards sur 40 ans de problèmes inverses en hydrogéologie. *C. R. Acad. Sci. Paris, Sciences de la terre et des planètes / Earth and Planetary Sciences* 329, 73–87.
- de Marsily, G., Ledoux, E., Levassor, A., Poitrinal, D., Salem, A., 1978. Modelling of large multilayered aquifer systems : Theory and applications. *J. Hydrol.* 36, 1–34.
- de Wit, M., Bendoricchio, G., 2001. Nutrient fluxes in the Po bassin. *Sci. Total Environ.* 273, 147–161.
- DeAngelis, D., Moreau, M., Neergaard, D., Mulholland, P., Marzolf, E., 1995. Modelling nutrient-periphyton dynamics in streams : the importance of transient storage zones. *Ecol. Model.* 80, 149–160.
- Décamps, H., 2006. Les eaux continentales. Institut de France - Académie des Sciences, Ch. Écosystèmes aquatiques, pp. 103–150.
- Delfs, J.-O., Blumensaat, F., Wang, W., Krebs, P., Kolditz, O., 2012. Coupling hydrogeological with surface runoff model in a Poltva case study in Western Ukraine. *Environ. Earth. Sci.* 65, 1439–1457.
- Dent, C., Henry, J., 1999. Modelling nutrient-periphyton dynamics in streams with surface-subsurface exchange. *Ecol. Model.* 122, 97–116.
- Desbarats, A., Logan, C., Hinton, M., Sharpe, D., 2002. On the kriging of water table elevations using collateral information from a digital elevation model. *J. Hydrol.* 255 (1-4), 25–38.
- Descy, J., Mouvet, C., 1984. Impact of the Tihange nuclear power plant on the periphyton and the phytoplankton of the Meuse River (Belgium). *Hydrobiologia* 119, 119–128.

- Descy, J.-P., Leita, M., Everbecq, E., Smits, J.-S., Delière, J.-F., 2012. Phytoplankton of the River Loire, France : a biodiversity and modelling study. *J. Plankton. Res.* 34 (2), 120–135.
- Discacciati, M., Miglio, E., Quarteroni, A., 2002. Mathematical and numerical models for coupling surface and groundwater flows. *Applied Numerical Mathematics* 43, 57–74.
- Distefano, N., Rath, A., 1975. An identification approach to subsurface hydrological systems. *Water Resour. Res.* 11(6), 1005–1012.
- Dixon, W., Chiswell, B., 1996. Review of aquatic monitoring program design. *Water Research* 30 (9), 1935–1948.
- Dixon, W., Smyth, G., Chiswell, B., 1999. Optimized selection of river sampling sites. *Water Research* 33 (4), 971–978.
- Doherty, J., 2003. Ground water model calibration using pilot points and regularization. *Ground Water* 41 (2), 170–177.
- Donn, M., Barron, O., Barr, A., 2012. Identification of phosphorus export from low-runoff yielding areas using combined application of high frequency water quality data and MODHMS modelling. *Sci. Total Environ.* 426, 264–271.
- Dooge, J., 1968. The hydrologic cycle as a closed system. *International Association of Scientific Hydrology. Bulletin* 13 (1), 58–68.
- Dooge, J., 1983. On the study of water. *Hydrological Sciences Journal* 28 (1), 23–48.
- Dooge, J., 1984. The waters of the Earth. *Hydrological Sciences Journal* 29 (2), 149–176.
- Ducharne, A., 2009. Reducing scale dependence in TOPMODEL using a dimensionless topographic index. *Hydrology and Earth System Sciences* 13, 2399–2412.
- Duff, J., Triska, F., 2000. Nitrogen biogeochemistry and surface-subsurface exchange in streams. In : Jones, J., Mulholland, P. (Eds.), *Streams and groundwaters*. Academic, pp. 197–220.
- Dunn, S., Ferrier, R., 1999. Natural flow in managed catchments : A case study of modelling approach. *Water Research* 33 (3), 621–630.
- Dunne, T., 1978. *Hillslope Hydrology*. Wiley, Ch. Field studies of hillslope flow processes, pp. 227–293.
- Durand, P., Torres, J. J., 1996. Solute transfer in agricultural catchments : the interest and limits of mixing models. *J. Hydrol.* 181, 1–22.
- Durand, Y., Burn, E., Merindol, L., Guyomarc'h, G., Lessafre, B., Martin, E., 1993. A meteorological estimation of relevant parameters for snow models. *Annals of Glaciology* 18, 65–71.
- Ebel, B., Loague, K., 2006. Physics-based hydrologic-response simulation : Seeing through the fog of equifinality. *Hydrol. Process.* 20, 2887–2900.
- Ebel, B. A., Loague, K., 2008. Rapid simulated hydrologic response within the variably saturated near surface. *Hydrological Processes* 22, 464–471.
- Ebel, B. A., Loague, K., Montgomery, D., Dietrich, W., 2008. Physics-based continuous simulation of long-term near-surface hydrologic response for the Coos Bay experimental catchment. *Water Resour. Res.* 44, W07417.
- Ebel, B. A., Mirus, B. B., Heppner, C. S., VanderKwaak, J. E., Loague, K., 2009. First-order exchange coefficient coupling for simulating surface water-groundwater interactions : parameter sensitivity and consistency with a physics-based approach. *Hydrological Processes* 23, 1949–1959.
- Edijatno, N., Yang, X., Makhoul, Z., Michel, C., 1999. GR3J : a daily watershed model with three free parameters. *Hydrological Sciences Journal* 44 (2), 263–278.

- Efstratiadis, A., Koutsoyiannis, D., 2010. One decade of multi-objective calibration approaches in hydrological modelling : A review. *Hydrological Sciences Journal* 55 (1), 58–78.
- Efstratiadis, A., Nalbantis, I., Koukouvinos, A., Rozos, E., Koutsoyiannis, D., 2008. HYDROGEIOS : A semi-distributed GIS-based hydrological model for modified river basins. *Hydrology and Earth System Sciences* 12, 989–1006.
- El-Shafie, A., Taha, M. R., Noureldin, A., 2007. A neuro-fuzzy model for inflow forecasting of the Nile river at Aswan high dam. *Water Resour. Manage.* 21, 533–556.
- Elliott, A., Oehler, F., Schmidt, J., Ekanayake, J., 2012. Sediment modelling with fine temporal and spatial resolution for a hilly catchment. *Hydrological Processes* 26 (24), 3645–3660.
- Ellis, P., Mackay, R., Rivett, M., 2007. Quantifying urban river-aquifer fluid exchange processes : A multi-scale problem. *Journal of Contaminant Hydrology* 91 (1-2), 58–80.
- Emsellem, Y., de Marsily, G., 1971. An automatic solution for the inverse problem. *Water Resour. Res.* 7 (5), 1264–1283.
- Engdahl, N., Volger, E., Weissmann, G., 2010. Evaluation of aquifer heterogeneity effects on river flow loss using a transition probability framework. *Water Resour. Res.* 46, W01506.
- Engeler, I., Hendricks Franssen, H., Müller, R., Stauffer, F., 2011. The importance of coupled modelling of variably saturated groundwater flow-heat transport for assessing river-aquifer interactions. *J. Hydrol.* 397 (3-4), 295–305.
- Etchevers, P., Golaz, C., Habets, F., 2001. Simulation of the water budget and the river flows of the Rhone basin from 1981 to 1994. *J. Hydrol.* 244, 60–85.
- Even, S., 1995. Modélisation d'un écosystème fluvial : la Seine - le modèle PROSE. Ph.D. thesis, Centre d'Informatique Géologique, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Even, S., Bacq, N., Ruelland, D., Billen, G., Garnier, J., Poulin, M., Théry, S., Blanc, S., 2007a. New tools for modelling water quality of hydrosystems : An application in the Seine River basin in the frame of the Water Framework Directive. *Sci. Total Environ.* 375 (1-3), 274–291.
- Even, S., Mouchel, J.-M., Servais, P., Flipo, N., Poulin, M., Blanc, S., Chabanel, M., Paffoni, C., 2007b. Modeling the impacts of Combined Sewer Overflows on the river Seine water quality. *Sci. Total Environ.* 375 (1-3), 140–151.
- Even, S., Poulin, M., Garnier, J., Billen, G., Servais, P., Chesterikoff, A., Coste, M., 1998. River ecosystem modelling : Application of the PROSE model to the Seine river (France). *Hydrobiologia* 373, 27–37.
- Even, S., Poulin, M., Mouchel, J.-M., Seidl, M., Servais, P., 2004. Modelling oxygen deficits in the Seine river downstream of combined sewer overflows. *Ecol. Model.* 173, 177–196.
- Even, S., Thouvenin, B., Bacq, N., Billen, G., Garnier, J., Guézennec, L., Blanc, S., Ficht, A., Hir, P. L., 2007c. An integrated modelling approach to forecast the impact of human pressure in the Seine estuary. *Hydrobiologia* 588 (1), 13–29.
- Ewen, J., Parkin, G., O'Connell, P., 2000. SHETRAN : Distributed river basin flow and transport modelling system. *Journal of Hydrologic Engineering* 5, 250–258.
- Fanelli, R., Lautz, L., 2008. Patterns of water, heat, and solute flux through streambeds around small dams. *Ground Water* 46, 671–687.
- Faulkner, B. R., Brooks, J. R., Forshay, K. J., Cline, S. P., 2012. Hyporheic flow patterns in relation to large river floodplain attributes. *J. Hydrol.* 448-449 (0), 161–173.
- Fazal, M., Imaizumi, M., Ishida, S., Kawachi, T., Tsuchihara, T., 2005. Estimating groundwater recharge using the SMAR conceptual model calibrated by genetic algorithm. *J. Hydrol.* 303, 56–78.

- Feast, N., Hiscock, K., Dennis, P., Andrews, J., 1998. Nitrogen isotope hydrochemistry and denitrification within the Chalk aquifer system of north Norfolk, UK. *J. Hydrol.* 211, 233–252.
- Fergusson, I., Maxwell, R., 2010. Role of groundwater in watershed response and land surface feedbacks under climate change. *Water Resour. Res.* 46, W00F02.
- Ferrant, S., Oehler, F., Durand, P., Ruiz, L., Salmon-Monviola, J., Justes, E., Dugast, P., Probst, A., Probst, J.-L., Sanchez-Perez, J.-M., 2011. Understanding nitrogen transfer dynamics in a small agricultural catchment : Comparison of a distributed (TNT2) and a semi distributed (SWAT) modeling approaches. *J. Hydrol.* 406, 1–15.
- Firat, M., 2008. Comparison of artificial intelligence techniques for river flow forecasting. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 12, 123–138.
- Fischer, H., List, E., Koh, R., Imberger, J., Brooks, N., 1979. *Mixing in Inland and Coastal Waters*. Academic press.
- Fleckenstein, J., Krause, S., Hannah, D., Boano, F., 2010. Groundwater-surface water interactions : New methods and models to improve understanding of processes and dynamics. *Advances in Water Resources* 33 (11), 1291–1295.
- Fleckenstein, J., Niswonger, R., Fogg, G., 2006. River-aquifer interactions, geologic heterogeneity, and low-flow management. *Ground Water* 44 (6), 837–852.
- Flipo, N., 2005. Modélisation intégrée des transferts d'azote dans les aquifères et les rivières : Application au bassin du Grand Morin. Ph.D. thesis, Centre d'Informatique Géologique, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Flipo, N., 2012. Introduction aux travaux de l'axe " interfaces nappe-rivière ". Tech. rep., PIREN Seine.
- Flipo, N., Even, S., Poulin, M., Ledoux, E., 2005. Hydrological part of CaWaQS (CATCHment WATER Quality Simulator) : fitting on a small sedimentary basin. *Verh. Internat. Verein. Limnol.* 29 (2), 768–772.
- Flipo, N., Even, S., Poulin, M., Théry, S., Ledoux, E., 2007a. Modelling nitrate fluxes at the catchment scale using the integrated tool CAWAQS. *Sci. Total Environ.* 375, 69–79.
- Flipo, N., Even, S., Poulin, M., Tusseau-Vuillemin, M.-H., Améziane, T., Dauta, A., 2004. Biogeochemical modelling at the river scale : Plankton and periphyton dynamics - Grand Morin case study, France. *Ecol. Model.* 176, 333–347.
- Flipo, N., Jeannée, N., Poulin, M., Even, S., Ledoux, E., 2007b. Assessment of nitrate pollution in the Grand Morin aquifers (France) : combined use of geostatistics and physically-based modeling. *Environ. Pollut.* 146 (1), 241–256.
- Flipo, N., Kurtulus, B., 2011. GEO-ANFIS : Application to piezometric head interpolation in unconfined aquifer unit. In : *Proceedings of FUZZYSS'11*. p. 6p.
- Flipo, N., Labarthe, B., Saleh, F., Mouchel, J.-M., Benoît, P., 2013a. Bilan des travaux du PIREN Seine sur la plaine alluviale de la Bassée et proposition d'un dispositif de mesure in situ des échanges nappe-rivière. Tech. rep., PIREN Seine.
- Flipo, N., Labarthe, B., Saleh, F., Pryet, A., Goblet, P., Viennot, P., Abasq, L., 2013b. Relations eaux souterraines-réseau hydrographique sur le bassin Seine Normandie : Quantification des flux hydriques. Tech. Rep. R130218NFLI, ARMINES-MINES ParisTech.
- Flipo, N., Monteil, C., Poulin, M., de Fouquet, C., Krimissa, M., 2012. Hybrid fitting of a hydrosystem model : long term insight into the Beauce aquifer functioning (France). *Water Resour. Res.* 48, W05509.
- Flipo, N., Mouhri, A., 2013. Avancement des travaux de l'axe "interfaces nappe-rivière". Tech. rep., PIREN Seine.

- Flipo, N., Rabouille, C., Poulin, M., Even, S., Tusseau-Vuillemin, M., Lalande, M., 2007c. Primary production in headwater streams of the Seine basin : the Grand Morin case study. *Sci. Total Environ.* 375, 98–109.
- Flipo, N., Rejiba, F., Kurtulus, B., Tournebize, J., Tallec, G., Vilain, G., Garnier, J., Ansart, P., Lotteau, M., 2009. Caractérisation des fonctionnements hydrologique et hydrogéologique du bassin de l'Orgeval. Tech. rep., PIREN Seine.
- Flipo, N., Saleh, F., Mouhri, A., Labarthe, B., 2013c. État de l'art sur la modélisation des échanges nappe-rivière. Tech. rep., PIREN Seine.
- Freeze, R., 1971. Three-dimensional, transient, saturated-unsaturated flow in a groundwater basin. *Water Resour. Res.* 7 (2), 347–366.
- Freeze, R., 1972a. Role of subsurface flow in generating runoff 1. Base flow contributions to channel flow. *Water Resour. Res.* 8, 609–624.
- Freeze, R., 1972b. Role of subsurface flow in generating runoff 2. Upstream source areas. *Water Resour. Res.* 8, 1272–1283.
- Freeze, R., Harlan, R., 1969. Blueprint for a physically-based digitally simulated, hydrologic response model. *J. Hydrol.* 9, 237–258.
- Frei, S., Fleckenstein, J., Kollet, S., Maxwell, R., 2009. Patterns and dynamics of river-aquifer exchange with variably-saturated flow using a fully-coupled model. *J. Hydrol.* 375, 383–393.
- Frei, S., Lischied, G., Fleckenstein, J., 2010. Effects of micro-topography on surface-subsurface exchange and runoff generation in a virtual riparian wetland - a modeling study. *Advances in Water Resources* 33 (11), 1388–1401.
- Frind, E., Duynisveld, W., Strebel, O., Boettcher, J., 1990. Modelling of multicomponent transport with microbial transformation in groundwater : The Fuhrberg case. *Water Resour. Res.* 26 (8), 1707–1719.
- Frind, E., Pinder, G. F., 1973. Galerkin solution of the inverse problem for aquifer transmissivity. *Water Resour. Res.* 9 (5), 1397–1410.
- Fu, S., Sonnenborg, T., Jensen, K., He, X., 2011. Impact of precipitan spatial resolution on the hydrological response of an integrated distributed water resources model. *Vadose Zone Journal* 10, 25–36.
- Furman, A., 2008. Modeling coupled surface-subsurface flow processes : A review. *Vadose Zone J.* 7 (2), 741–756.
- Galéa, G., Prudhomme, C., 1997. Basic notions and useful concepts for understanding the modeling of flood regimes of basins in QdF models. *Revue des Sciences de l'Eau* 10 (1), 83–101.
- Gallagher, M., Doherty, J., 2007. Parameter interdependence and uncertainty induced by lumping in a hydrologic model. *Water Resour. Res.* 43, W05421.
- Galloway, J., Dentener, F., Capone, D., Boyer, E., Howarth, R., Seitzinger, S., Asner, G., Cleveland, C., Green, P., Holland, E., Karl, D., Michaels, A., Porter, J., Townsend, A., Vörösmarty, C., 2004. Nitrogen cycles : past, present, and future. *Biogeochemistry* 70, 153–226.
- Garcia, L., Shigidib, A., 2006. Using neural networks for parameter estimation in ground water. *J. Hydrol.* 318, 215–231.
- Garnier, J., Beusen, A., Thieu, V., Billen, G., Bouwman, L., 2010. N :P :Si nutrient export ratios and ecological consequences in coastal seas evaluated by the ICEP approach. *Global Biogeochem. Cycles* 24, GB0A05.
- Garnier, J., Billen, G., Coste, M., 1995. Seasonal succession of diatoms and chlorophyceae in the drainage network of the river Seine : Observations and modelling. *Limnol. Oceanogr.* 40 (4), 750–765.
- Garnier, J., Billen, G., Sanchez, N., Leporcq, B., 2000. Ecological functioning of the Marne reservoir (upper Seine basin, France). *Regul. Rivers : Res. Mgmt.* 16, 51–71.

- Garnier, J., Brion, N., Callens, J., Passy, P., Deligne, C., Billen, G., Servais, P., Billen, C., 2012. Modeling historical changes in nutrient delivery and water quality of the Zenne River (1790s-2010) : The role of land use, waterscape and urban wastewater management. *J. Mar. System* In press, xxx.
- Garnier, J., Némery, J., Billen, G., Théry, S., 2005. Nutrient dynamics and control of eutrophication in the Marne river system : modelling the role of exchangeable phosphorus. *J. Hydrol.* 304, 397–412.
- Gaukroger, A., Werner, A., 2011. On the Panday and Huyakorn surface-subsurface hydrology test case : analysis of internal flow dynamics. *Hydrological Processes* 25, 2085–2093.
- Gauthier, M., Camporese, M., Rivard, C., Paniconi, C., Larocque, M., 2009. A modeling study of heterogeneity and surface water-groundwater interactions in the Thomas Brook catchment, Annapolis Valley (Nova Scotia, Canada). *Hydrology and Earth System Sciences* 13, 1583–1596.
- Gedeon, M., Wemaere, I., Marivoet, J., 2007. Regional groundwater model of north-east Belgium. *J. Hydrol.* 335, 133–139.
- Genereux, D. P., Leahy, S., Mitsova, H., Kennedy, C. D., Corbett, D. R., 2008. Spatial and temporal variability of streambed hydraulic conductivity in West Bear Creek, North Carolina, USA. *J. Hydrol.* 358, 332–353.
- Gill, M., Kaheil, Y., Khalil, A., McKee, M., Bastidas, L., 2006. Multiobjective particle swarm optimization for parameter estimation in hydrology. *Water Resour. Res.* 42, W07417.
- Girard, G., Ledoux, E., Villeneuve, J.-P., 1981. Le modèle couplé - simulation conjointe des écoulements de surface et des écoulements souterrains sur un système hydrologique. In : *Cah. ORSTOM*. Vol. XVIII of *Hydrol.*
- Giudici, M., Delay, F., de Marsily, G., Parravicini, G., Ponzini, G., Rosazza, A., 1998. Discrete stability of the differential system method evaluated with geostatistical techniques. *Stochastic Hydrology and Hydraulics* 12 (3), 191–204.
- Giudici, M., Morossi, G., Parravicini, G., Ponzini, G., 1995. A new method for the identification of distributed transmissivities. *Water Resour. Res.* 31 (8), 1969–1988.
- Giudici, M., Vassena, C., 2006. dsm.f90 : A computer code for the solution of an inverse problem of ground water hydrology by the differential system method. *Computers and Geosciences* 32, 1709–1719.
- Goblet, P., 2010. Programme METIS - Simulation d'écoulement et de transport miscible en milieu poreux et fracturé - Notice de conception mise à jour le 6/09/10. Tech. rep., Centre de Géosciences - Ecole des Mines de Paris.
- Goderniaux, P., Brouyère, S., Fowler, H., Blenkinsop, S., Therrien, R., Orban, P., Dassargues, A., 2009. Large scale surface-subsurface hydrological model to assess climate change impacts on groundwater reserves. *J. Hydrol.* 373 (1-2), 122–138.
- Golaz-Cavazzi, C., 1999. Modélisation hydrologique à l'échelle régionale appliquée au bassin du Rhône. Ph.D. thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Golaz-Cavazzi, C., Etchevers, P., Habets, F., Ledoux, E., Noilhan, J., 2001. Comparison of two hydrological simulations of the Rhône basin. *Physics and Chemistry of the Earth* 26, 461–466.
- Gomez, E., 2002. Modélisation intégrée du transfert de nitrate à l'échelle régionale dans un système hydrologique. application au bassin de la Seine. Ph.D. thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, Centre d'Informatique Géologique.
- Gomez, E., Ledoux, E., Viennot, P., Mignolet, C., Benoît, M., Bornerand, C., Schott, C., Mary, B., Billen, G., Ducharme, A., Brunstein, D., 2003. Un outil de modélisation intégrée du transfert des nitrates sur un système hydrologique : Application au bassin de la Seine. *La Houille Blanche* 3-2003, 38–45.
- Gomez-Hernandez, J., Sahuquillo, A., Capilla, J., 1997. Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data-I. theory. *J. Hydrol.* 203, 162 –174.

- Gonzalez, R. V., Giudici, M., Ponzini, G., Parravicini, G., 1997. The differential system method for the identification of transmissivity and storativity. *Transport in Porous Media* 26, 339–371.
- Gooseff, M., Anderson, J., Wondzell, S., LaNier, J., Haggerty, R., 2006. A modelling study of hyporheic exchange pattern and the sequence, size, and spacing of stream bedforms in mountain stream networks, Oregon, USA. *Hydrological Processes* 20, 2443–2457.
- Gooseff, M., McGlynn, B., 2005. A stream tracer technique employing ionic tracers and specific conductance data applied to the Maimai catchment, New Zealand. *Hydrological Processes* 19, 2491–2506.
- Gordon, R., Lautz, L., Briggs, M., McKenzie, J., 2012. Automated calculation of vertical pore-water flux from field temperature time series using the VFLUX method and computer program. *J. Hydrol.* 420–421, 142–158.
- Graf, T., Therrien, R., 2008. A method to discretize non-planar fractures for 3d subsurface flow and transport simulations. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 56, 2069–2090.
- Graillot, D., Paron, F., Lalot, E., Marmonier, P., Bornette, G., Piscart, C., Arthaud, F., Flipo, N., Mouhri, A., Habets, F., Thierion, C., Rejiba, F., Bodet, L., Guérin, R., Talleg, G., Chatelier, M., Douez, O., Maugis, P., 2012. Caractérisation des échanges nappes/rivières à l'échelle du tronçon ou du linéaire par métrique expérimentale ou par modélisation jusqu'à l'échelle régionale. Tech. rep., ARMINES & ONEMA.
- Green, C., Böhlke, J., Bekins, B., Phillips, S., 2010. Mixing effects on apparent reaction rates and isotope fractionation during denitrification in a heterogeneous aquifer. *Water Resour. Res.* 46, W08525.
- Green, P., Vörösmarty, C., Meybeck, M., Galloway, J., Peterson, B., Boyer, E., 2004. Pre-industrial and contemporary fluxes of nitrogen through rivers : a global assessment based on typology. *Biogeochemistry* 68, 71–105.
- Greswell, R., Ellis, P., Cuthbert, M., White, R., Durand, V., 2009. The design and application of an inexpensive pressure monitoring system for shallow water level measurement, tensiometry and piezometry. *J. Hydrol.* 373 (3–4), 416–425.
- Grizzetti, B., Bouraoui, F., Aloe, A., 2012. Changes of nitrogen and phosphorus loads to European seas. *Global Change Biology* 18, 769–782.
- Grizzetti, B., Bouraoui, F., de Marsily, G., 2008. Assessing nitrogen pressures on European surface water. *Global Biogeochem. Cycles* 22, GB4023.
- Groleau, A., Escoffier, N., Bensoussan, N., Flipo, N., Poulin, M., Vilmin, L., Bernard, C., Rocher, V., Métivier, F., 2012. Biogéochimie haute résolution : Bilan méthodologique et présentation des observations pour l'année 2011. Tech. rep., PIREN Seine.
- Grote, U., Craswell, E., Vlek, P., 2005. Nutrient flows in international trade : Ecology and policy issues. *Environ. Sc. Policy* 8, 439–451.
- Gunduz, O., Aral, M., 2005. River networks and groundwater flow : a simultaneous solution of a coupled system. *J. Hydrol.* 301, 216–234.
- Güntner, A., Uhlenbrook, S., Seibert, J., Leibundgut, C., 1999. Multi-criterial validation of TOPMODEL in a mountainous catchment. *Hydrological Processes* 13, 1603–1620.
- Gupta, H., Sorooshian, S., Yapo, P., 1998. Toward improved calibration of hydrologic models : Multiple and noncommensurable measures of information. *Water Resour. Res.* 34 (4), 751–763.
- Habets, F., Boone, A., Champeaux, J., Etchevers, J.-L., Franchistéguy, P., Leblois, E., Moigne, P. L., Martin, E., Morel, S., Noilhan, J., Quintana-Seguí, P., Rousset-Regimbeau, F., Vienne, P., 2008. The SAFRAN-ISBA-MODCOU hydrometeorological model applied over France. *J. Geophys. Res.* 113, D06113.
- Habets, F., Ducrocq, V., Noilhan, J., 2005. Prévisions hydrologiques et échelles spatiales : l'exemple des modèles opérationnels de Météo-France. *C. R. Geosciences* 337, 181–193.

- Habets, F., Etchevers, P., Golaz, C., Leblois, E., Ledoux, E., Martin, E., Noilhan, J., Ottlé, C., 1999a. Simulation of the water budget and the river flows of the Rhône basin. *Journal of Geophysical Research* 104 (D24), 31145–31172.
- Habets, F., Gascoin, S., Korkmaz, S., Thiéry, D., Zribi, M., Amraoui, N., Carli, M., Ducharne, A., Leblois, E., Ledoux, E., Martin, E., Noilhan, J., Ottlé, C., Viennot, P., 2010. Multi-model comparison of a major flood in the groundwater-fed basin of the Somme River (France). *Hydrology and Earth System Sciences* 14, 99–117.
- Habets, F., Noilhan, J., Golaz, C., Goutorbe, J., Lacarrère, P., Leblois, E., Ledoux, E., Martin, E., Ottlé, C., Vidal-Madjar, D., 1999b. The ISBA surface scheme in a macroscale hydrological model applied to the Hapex-Mobilhy area Part I : Model and database. *J. Hydrol.* 217, 75–96.
- Habets, F., Noilhan, J., Golaz, C., Goutorbe, J., Lacarrère, P., Leblois, E., Ledoux, E., Martin, E., Ottlé, C., Vidal-Madjar, D., 1999c. The ISBA surface scheme in a macroscale hydrological model applied to the Hapex-Mobilhy area Part II : Simulation of streamflows and annual water budget. *J. Hydrol.* 217, 97–118.
- Haitjema, H., Kelson, V., de Lange, W., 2001. Selecting MODFLOW cell sizes for accurate flow fields. *Ground Water* 39 (6), 931–938.
- Hancock, P., Boulton, A., Humphreys, W., 2005. Aquifers and hyporheic zones : Towards an ecological understanding of groundwater. *Hydrogeology Journal* 13 (1), 98–111.
- Hansen, J., Refsgaard, J., Hansen, S., Ernsten, V., 2007. Problems with heterogeneity in physically based agricultural catchment models. *J. Hydrol.* 342 (1-2), 1–16.
- Hanson, R., Schmid, W., Faunt, C., Lockwood, B., 2010. Simulation and analysis of conjunctive use with MODFLOW's farm process. *Ground Water* 48 (5), 674–689.
- Harbaugh, A., Banta, E., Hill, M., McDonald, M., 2000. MODFLOW-2000, the U.S. Geological Survey modular ground-water model : User guide to modularization concepts and the ground-water flow process. Tech. Rep. 00-92, USGS.
- Harvey, J., Bencala, K., 1993. The effect of streambed topography on surface-subsurface water exchange in mountain catchments. *Water Resour. Res.* 29 (1), 89–98.
- Harvey, J., Wagner, B., Bencala, K., 1996. Evaluating the reliability of the stream tracer approach to characterize stream-subsurface water exchange. *Water Resour. Res.* 32 (8), 2441–2451.
- Haslauer, C., Guthke, P., Bárdossy, A., Sudicky, E., 2012. Effects of non-Gaussian copula-based hydraulic conductivity fields on macrodispersion. *Water Resour. Res.* 48, W07507.
- Hatch, C., Fisher, A., Revenaugh, J., Constantz, J., Ruehl, C., 2006. Quantifying surface water-groundwater interactions using time series analysis of streambed thermal records : Method development. *Water Resour. Res.* 42 (10), 10410.
- Hayashi, M., Rosenberry, D., 2002. Effects of ground water exchange on the hydrology and ecology of surface water. *Ground Water* 40 (3), 309–316.
- Hayashi, M., Vogt, T., Mächler, L., Schirmer, M., 2012. Diurnal fluctuations of electrical conductivity in a pre-alpine river : Effects of photosynthesis and groundwater exchange. *J. Hydrol.* 450-451, 93–104.
- Hefez, E., Shamir, U., Bear, J., 1975. Identifying the parameters of an aquifer cell model. *Water Resour. Res.* 11 (6), 993–1004.
- Hefting, M., Clément, J., Dowrick, D., Cosandey, A., Bernal, S., Cimpian, C., Tatur, A., Burt, T., Pinay, G., 2004. Water table elevation controls on soil nitrogen cycling in riparian wetlands along a European climatic gradient. *Biogeochemistry* 67, 113–134.
- Heidari, M., Ranjithan, S., 1998. A hybrid optimization approach to the estimation of distributed parameters in two-dimensional confined aquifers. *Journal of the American Water Resources Association* 34 (4), 909–920.

- Henderson, R., Day-Lewis, F., Harvey, C., 2009. Investigation of aquifer-estuary interaction using wavelet analysis of fiber-optic temperature data. *Geophysical Research Letters* 36 (6), 1–6.
- Hendricks Franssen, H., Alcolea, A., Riva, M., Bakr, M., van der Wiel, N., Stauffer, F., Guadagnini, A., 2009. A comparison of seven methods for the inverse modelling of groundwater flow. Application to the characterisation of well catchments. *Advances in Water Resources* 32, 851–872.
- Henriksen, H., Trolborg, L., Hojberg, A., Refsgaard, J., 2008. Assessment of exploitable groundwater resources of Denmark by use of ensemble resource indicators and a numerical groundwater-surface water model. *J. Hydrol.* 348, 224–240.
- Henriksen, H., Trolborg, L., Nyegaard, P., Sonnenborg, T., Refsgaard, J., Madsen, B., 2003. Methodology for construction, calibration and validation of a national hydrological model for Denmark. *J. Hydrol.* 280 (1-4), 52–71.
- Heppner, C., Loague, K., 2008. Characterizing long-term hydrologic-response and sediment-transport for the R-5 catchment. *J. Environ. Qual.* 37, 2181–2191.
- Heppner, C., Loague, K., VanderKwaak, J., 2007. Long-term InHM simulations of hydrologic response and sediment transport for the R-5 catchment. *Earth Surface Processes and Landforms* 32, 1273–1292.
- Heppner, C., Ran, Q., VanderKwaak, J., Loague, K., 2006. Adding sediment transport to the integrated hydrology model (InHM) : Development and testing. *Advances in Water Resources* 29, 930–943.
- Hernandez, A., Neuman, S., Guadagnini, A., Carrera, J., 2003. Conditioning mean steady state flow on hydraulic head and conductivity through geostatistical inversion. *Stoch. Environ. Res. Risk. Assess.* 17, 329–338.
- Hester, E., Doyle, M., 2008. In-stream geomorphic structures as drivers of hyporheic exchange. *Water Resour. Res.* 44, W03417.
- Heuvelmans, G., Muys, B., Feyen, J., 2006. Regionalisation of the parameters of a hydrological model : Comparison of linear regression models with artificial neural nets. *J. Hydrol.* 319 (1-4), 245–265.
- Hill, A., Labadia, C., Sanmugadas, K., 1998. Hyporheic zone hydrology and nitrogen dynamics in relation to the streambed topography of a n-rich stream. *Biogeochemistry* 42, 285–310.
- Hill, M., 2006. The practical use of simplicity in developing ground water models. *Ground Water* 44, 775–781.
- Hill, W., Boston, H., 1991. Community development alters photosynthesis-irradiance relations in stream periphyton. *Limnol. Oceanogr.* 36 (7), 1375–1389.
- Hoeksema, R., Clapp, R., Thomas, A., Hunley, A., Farrow, N., Dearstone, K., 1989. Cokriging model for estimation of water table estimation. *Water Resour. Res.* 25 (3), 429–438.
- Hoeksema, R., Kitanidis, P., 1985. Comparison of gaussian conditional mean and kriging estimation in the geostatistical solution of the inverse problem. *Water Resour. Res.* 21 (6), 825–836.
- Horton, R., 1933. The role of infiltration in the hydrologic cycle. *Trans. Am. Geophys. Union* 14, 446–460.
- House, W., Warwick, M., 1998a. A mass-balance approach to quantifying the importance of in-stream processes during nutrient transport in a large river catchment. *Sci. Total Environ.* 210/211, 139–152.
- House, W., Warwick, M., 1998b. A mass-balance approach to quantifying the importance of in-stream processes during nutrient transport in a large river catchment. *Sci. Total Environ.* 210/211, 139–152.
- Howarth, R., Billen, G., Swaney, D., Townsend, A., Jaworski, N., Lajtha, K., Downing, J., Elmgren, R., Caraco, N., Jordan, T., Berendse, F., Freney, J., Kudeyarov, V., Murdoch, P., Zhao-Liang, Z., 1996. Regional nitrogen budgets and riverine N and P fluxes for the drainages to the North Atlantic Ocean : Natural and human influences. *Biogeochemistry* 35, 75–139.
- Hudak, P., 2000. Regional trends in nitrate content of Texas groundwater. *J. Hydrol.* 228, 37–47.

- Hug, M., 1975. *Mécanique des fluides appliquée*. Editions Eyrolles.
- Hundecha, Y., Bárdossy, A., 2004. Modeling of the effect of land use changes on the runoff generation of a river basin through parameter regionalization of a watershed model. *J. Hydrol.* 292 (1-4), 281 – 295.
- Hunt, R., Doherty, J., Tonkin, M., 2007. Are models too simple? Arguments for increased parameterization. *Ground Water* 45 (3), 254–262.
- Hunt, R., Haitjema, H., Krohelski, J., Feinstein, D., 2003. Simulating ground water-lake interactions : Approaches and Insights. *Ground Water* 41 (2), 227–237.
- Hussein, M., Schwartz, F., 2003. Modeling of flow and contaminant transport in coupled stream-aquifer systems. *J. Contaminant hydrology* 65, 41–64.
- Irvine, D., Brunner, P., Hendricks Franssen, H.-J., Simmons, G., 2012. Heterogeneous or homogeneous? Implications of simplifying heterogeneous streambeds in models of losing streams. *J. Hydrol.* 424-425, 16–23.
- Ivanov, P., Masliev, I., Kularathna, M., De Marchi, C., Somlyódy, L., 1996. *DESERT User's manual*. Tech. rep., International Institute for Applied Systems Analysis, Austria - Institute for Water and Environmental Problems, Russia.
- Ivanov, V., Vivoni, E., Bras, R., Entekhabi, D., 2004. Preserving high-resolution surface and rainfall data in operational-scale basin hydrology : a fully-distributed physically-based approach. *J. Hydrol.* 298, 80–111.
- Jain, S., Storm, B., Bathurst, J., Refsgaard, J., Singh, R., 1992. Application of the SHE to catchments in india Part 2. Field experiments and simulation studies with the SHE on the Kolar subcatchment of the Narmada river. *J. Hydrol.* 140, 1–4.
- Jang, J., 1993. ANFIS adaptive-network-based fuzzy inference systems. *IEEE Trans. Systems, Man, Cybern.* 23 (3), 665–685.
- Jang, J., 1995. Neuro-fuzzy modeling and control. *Proceedings of the IEEE* 83 3, 378–406.
- Jang, J., 1996. Input selection for ANFIS learning. *IEEE International Conference on Fuzzy Systems* 2, 1493–1499.
- Jardani, A., Dupont, J., Revil, A., Massei, N., Fournier, M., Laignel, B., 2012. Geostatistical inverse modeling of the transmissivity field of a heterogeneous alluvial aquifer under tidal influence. *J. Hydrol.* 472-473, 287–300.
- Jarvie, H., Neal, C., Withers, P., Wescott, C., Acornley, R., 2005. Nutrient hydrochemistry for a groundwater-dominated catchment : The Hampshire Avon, UK. *Sci. Total Environ.* 344, 143–158.
- Jensen, J., Engesgaard, P., 2011. Nonuniform groundwater discharge across a streambed : Heat as a tracer. *Vadose Zone Journal* 10 (1), 98.
- Jeppesen, J., Christensen, S., Ladefeldt, U., 2011. Modelling the historical water cycle of the Copenhagen area 1850-2003. *J. Hydrol.* 404, 117–129.
- Ji, S.-H., Park, Y.-J., Sudicky, E., Sykes, J., 2008. A generalized transformation approach for simulating steady-state variably-saturated subsurface flow. *Advances in Water Resources* 31, 313–323.
- Jobson, H., Harbaugh, A., 1989. Modifications to the diffusion analogy surface-water flow model (DAFLOW) for coupling to the modular finite difference ground-water flow model (MODFLOW). Tech. rep., U.S. Geological Survey.
- Jolly, I., Rassam, D., 2009. A review of modelling of groundwater-surface water interactions in arid/semi-arid floodplains. In : 18th World IMACS / MODSIM Congress.
- Jones, J., Holmes, R., 1996. Surface-subsurface interactions in stream ecosystems. *Trends Ecol. Evol.* 11 (6), 239–242.

- Jones, J., Sudicky, E., Brookfield, A., Park, Y.-J., 2006. An assessment of the tracer-based approach to quantifying groundwater contributions to streamflow. *Water Resour. Res.* 42, W02407.
- Jones, J., Sudicky, E., McLaren, R., 2008. Application of a fully-integrated surface-subsurface flow model at the watershed-scale : A case study. *Water Resour. Res.* 44, W03407.
- Jones, J., Woodward, C., 2001. Newton-krylov-multigrid solvers for large-scale, highly heterogeneous, variably saturated flow problems. *Advances in Water Resources* 24, 763–774.
- Jorgensen, L., Stockmarr, J., 2009. Groundwater monitoring in Denmark : characteristics, perspectives and comparison with other countries. *Hydrogeology Journal* 17, 827–842.
- Journal, A., 1986. Geostatistics : Models and Tools for the Earth Sciences. *Mathematical Geology* 18 (1), 119–140.
- Jyrkama, M., Sykes, J., Normani, S., 2002. Recharge estimation for transient ground water modeling. *Ground Water* 40 (6), 638–648.
- Kalbus, E., Reinstof, F., Schirner, M., 2006. Measuring methods for groundwater - surface water interactions : a review. *Hydrology and Earth System Sciences* 10, 873–887.
- Kalbus, E., Schmidt, C., Bayer-Raich, M., Leschik, S., Reinstorf, F., Balcke, G., Schirmer, M., 2007. New methodology to investigate potential contaminant mass fluxes at the stream-aquifer interface by combining integral pumping tests and streambed temperatures. *Environmental Pollution* 148 (3), 808–816.
- Kalbus, E., Schmidt, C., Molson, J., Reinstorf, F., Schirmer, M., 2009. Influence of aquifer and streambed heterogeneity on the distribution of groundwater discharge. *Hydrology and Earth System Sciences* 13, 69–77.
- Kalf, F., Woolley, D., 2005. Applicability and methodology of determining sustainable yield in groundwater systems. *Hydrogeology Journal* 13, 295–312.
- Kallis, G., 2007. When is it coevolution ? *Ecological Economics* 62, 1–6.
- Kao, J.-J., Li, P.-H., Hu, W.-S., 2012. Optimization models for siting water quality monitoring stations in a catchment. *Environ. Monit. Assess.* 184, 43–52.
- Karahan, H., Ayvaz, M., 2008. Simultaneous parameter identification of a heterogeneous aquifer system using artificial neural networks. *Hydrogeology Journal* 16, 817–827.
- Kasahara, T., Hill, A., 2006a. Effects of riffle-step restoration on hyporheic zone chemistry in n-rich lowland streams. *Can. J. Fish. Aquat. Sci.* 63, 120–133.
- Kasahara, T., Hill, A., 2006b. Hyporheic exchange flows induced by constructed riffles and steps in lowland streams in southern Ontario, Canada. *Hydrological Processes* 20, 4287–4305.
- Kasahara, T., Wondzell, S., 2003. Geomorphic controls on hyporheic exchange flow in mountain streams. *Water Resour. Res.* 39 (1), 1005.
- Kaser, D., Binley, A., Heathwaite, A., Krause, S., 2009. Spatio-temporal variations of hyporheic flow in a riffle-step-pool sequence. *Hydrological Processes* 23 (15), 2138–2149.
- Kauark-Leite, L., 1990. Réflexions sur l'utilité des modèles mathématiques dans la gestion de la pollution diffuse d'origine agricole. Ph.D. thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- Keery, J., Binley, A., Crook, N., Smith, J., 2007. Temporal and spatial variability of groundwater-surface water fluxes : Development and application of an analytical method using temperature time series. *J. Hydrol.* 336 (1-2), 1–16.
- Kholghi, M., Hosseini, S. M., 2006. Estimation of aquifer transmissivity using kriging, artificial neural network, and neuro-fuzzy models. *Journal of Spatial Hydrology* 6, 68–81.

- Kholghi, M., Hosseini, S. M., 2009. Comparison of groundwater level estimation using neuro-fuzzy and ordinary kriging. *Environ Model Assess* 14 (6), 729–737.
- Khu, S.-T., Madsen, H., di Pierro, F., 2008. Incorporating multiple observations for distributed hydrologic model calibration : An approach using a multi-objective evolutionary algorithm and clustering. *Advances in Water Resources* 31, 1387–1398.
- Kikuchi, C., Ferré, T., Welker, J., 2012. Spatially telescoping measurements for improved characterization of ground water-surface water interactions. *J. Hydrol.* 446–447, 1–12.
- Kim, J., Warnock, A., Ivanov, V., Katopodes, N., 2012. Coupled modeling of hydrologic and hydrodynamic processes including overland and channel flow. *Advances in Water Resources* 37, 104–126.
- Kim, K.-H., Yun, S.-T., Choi, B.-Y., Chae, G.-T., Joo, Y., Kim, K., Kim, H.-S., 2009. Hydrochemical and multivariate statistical interpretations of spatial controls of nitrate concentrations in a shallow alluvial aquifer around oxbow lakes (Osong area, central Korea). *J. Contaminant hydrology* 107, 114–127.
- Kim, K.-Y., Chon, C.-M., Park, K.-H., Park, Y.-S., Woo, N.-C., 2008. Multi-depth monitoring of electrical conductivity and temperature of groundwater at a multilayered coastal aquifer : Jeju Island, Korea. *Hydrological Processes* 22, 3724–3733.
- Kinzelbach, W., Schäfer, W., Herzer, J., 1991. Numerical modeling of natural and enhanced denitrification processes in aquifers. *Water Resour. Res.* 27 (6), 1123–1135.
- Kirchner, J., Feng, X., Neal, C., Robson, A., 2004. The fine structure of water-quality dynamics : the (high-frequency) wave of the future. *Hydrological Processes* 18, 1353–1359.
- Kitanidis, P., Vomvoris, E., 1983. A geostatistical approach to the inverse problem in groundwater modeling (steady state) and one-dimensional simulations. *Water Resour. Res.* 19 (3), 677–690.
- Kitsiou, D., Karydis, M., 2011. Coastal marine eutrophication assessment : A review on data analysis. *Environment International* 37, 778–801.
- Kjellin, J., Hallin, S., Wörman, A., 2007. Spatial variations in denitrification activity in wetland sediments explained by hydrology and denitrifying community structure. *Water Research* 41, 4710–4720.
- Klemes, V., 1983. Conceptualization and scale in hydrology. *J. Hydrol.* 65, 1–23.
- Koch, J., McKnight, D., Neupauer, R., 2011. Simulating unsteady flow, anabranching, and hyporheic dynamics in a glacial meltwater stream using a coupled surface water routing and groundwater flow model. *Water Resour. Res.* 47, W05530.
- Kolditz, O., Bauer, S., Beyer, C., Böttcher, N., Dietrich, P., Görke, U.-J., Kalbacher, T., Park, C.-H., Sauer, U., Schtze, C., Shao, H., Singh, A., Taron, J., Wang, W., Watanabe, N., 2012a. A systematic benchmarking approach for geologic CO₂ injection and storage. *Environ. Earth. Sci.* 67 (2), 613–632.
- Kolditz, O., Bauer, S., Bilke, L., Böttcher, N., Delfs, J. O., Fischer, T., Görke, U. J., Kalbacher, T., Kosakowski, G., McDermott, C. I., Park, C. H., Radu, F., Rink, K., Shao, H., Shao, H. B., Sun, F., Sun, Y. Y., Singh, A. K., Taron, J., Walther, M., Wang, W., Watanabe, N., Wu, Y., Xie, M., Xu, W., Zehner, B., 2012b. Open-GeoSys : an open-source initiative for numerical simulation of thermo-hydro-mechanical/chemical (THM/C) processes in porous media. *Environ. Earth. Sci.* 67 (2), 589–599.
- Kolditz, O., Delfs, J., Bürger, C., Beinhorn, M., Parkee, C., 2008. Numerical analysis of coupled hydrosystems based on an object-oriented compartment approach. *Journal of Hydroinformatics* 10, 227–244.
- Kolditz, O., Du, Y., Bürger, C., Delfs, J., Kuntz, D., Beinhorn, M., Hess, M., Wang, W., van der Grift, B., te Stroet, C., 2007. Development of a regional hydrologic soil model and application to the Beerze-Reusel drainage basin. *Environmental Progress* 148, 855–866.
- Kollet, S., 2009. Influence of soil heterogeneity on evapotranspiration under shallow water table conditions : transient, stochastic simulations. *Environ. Res. Lett.* 4, 035007.

- Kollet, S. J., Maxwell, R. M., 2006. Integrated surface-groundwater flow modeling : A free-surface overland flow boundary condition in a parallel groundwater flow model. *Advances in Water Resources* 29, 945–958.
- Kollet, S. J., Maxwell, R. M., 2008. Capturing the influence of groundwater dynamics on land surface processes using an integrated, distributed watershed model. *Water Resour. Res.* 44, W02402.
- Kollet, S. J., Maxwell, R. M., Woodward, C., Smith, S., Vanderborght, J., Vereecken, H., Simmer, C., 2010. Proof of concept of regional scale hydrologic simulations at hydrologic resolution utilizing massively parallel computer. *Water Resour. Res.* 46, W04201.
- Koo, B., O'Connell, P., 2006. An integrated modelling and multicriteria analysis approach to managing nitrate diffuse pollution : 2. A case study for a chalk catchment in England. *Sci. Total Environ.* 358, 1–20.
- Korkmaz, S., 2007. Modeling of the flood regimes in coupled stream-aquifer systems. Ph.D. thesis, Ecole des Mines de Paris.
- Korkmaz, S., Ledoux, E., Önder, H., 2009. Application of the coupled model to the Somme river basin. *J. Hydrol.* 366 (1-4), 21–34.
- Korom, S., 1992. Natural denitrification in the saturated zone : A review. *Water Resour. Res.* 28 (6), 1657–1668.
- Krause, S., Blume, T., Cassidy, N., 2012. Investigating patterns and controls of groundwater up-welling in a lowland river by combining fibre-optic distributed temperature sensing with observations of vertical head gradients. *Hydrology and Earth System Sciences* 16 (1), 1775–1792.
- Krause, S., Bronstert, A., 2007. The impact of groundwater-surface water interactions on the water balance of a mesoscale lowland river catchment in northeastern Germany. *Hydrological Processes* 21, 169–184.
- Krause, S., Bronstert, A., Zehe, E., 2007. Groundwater-surface water interactions in a North German lowland floodplain - Implications for the river discharge dynamics and riparian water balance. *J. Hydrol.* 347, 404–417.
- Krause, S., Bronstert, A., Zehe, E., 2009a. Seasonal variability of groundwater-surface exchange and its implications for riparian groundwater nitrate retention at the Havel River. *Intl. J. River Basin Management* 7 (4), 329–343.
- Krause, S., Hannah, D., Fleckenstein, J., 2009b. Hyporheic hydrology : interactions at the groundwater-surface water interface. *Hydrological Processes* 23, 2103–2107.
- Krause, S., Heathwaite, L., Binley, A., Keenan, P., 2009c. Nitrate concentration changes at the groundwater-surface water interface of a small Cumbrian River. *Hydrological Processes* 23, 2195–2211.
- Krause, S., Jacobs, J., Voss, A., Bronstert, A., Zehe, E., 2008. Assessing the impact of changes in landuse and management practices on the diffuse pollution and retention of nitrate in a riparian floodplain. *Sci. Total Environ.* 389, 146–164.
- Kunkel, R., Bach, M., Behrendt, H., Wendland, F., 2004. Groundwater-borne nitrate intakes into surface waters in Germany. *Water Science and Technology* 49 (3), 11–19.
- Kurtulus, B., Flipo, N., 2012. Hydraulic head interpolation using ANFIS - Model selection and sensitivity analysis. *Computers and Geosciences* 38 (1), 43–51.
- Kurtulus, B., Flipo, N., Goblet, P., 2010. Sensitivity analysis on an adaptative neuro fuzzy inference system (ANFIS) for hydraulic head interpolation : the Orgeval experimental site/France. In : Carrera, J. (Ed.), XVIII International Conference on Water Resources CMWR 2010. p. 8p.
- Kurtulus, B., Flipo, N., Goblet, P., Vilain, G., Tournebize, J., Tallec, G., 2011. Hydraulic head interpolation in an aquifer unit using ANFIS and ordinary kriging. In : *Studies in computational intelligence*. No. 343. Springer, pp. 265–273.

- Kurtulus, B., Razack, M., 2007. Evaluation of the ability of an artificial neural network model to simulate the input-output responses of a large karstic aquifer. The La Rochefoucauld (Charente, France). *Hydrogeology Journal* 15 (2), 241–254.
- LaBolle, E., Ahmed, A., Fogg, G., 2003. Review of the integrated groundwater and surface-water model (IGSM). *Ground Water* 41(2), 238–46.
- Lamb, R., Beven, K., Myrabo, S., 1998. Use of spatially distributed water table observations to constrain uncertainty in a rainfall-runoff model. *Advances in Water Resources* 22 (4), 305–317.
- Lancelot, C., Gypens, N., Billen, G., Garnier, J., Roubex, V., 2007. Testing an integrated river-ocean mathematical tool for linking marine eutrophication to land use : The *Phaeocystis*-dominated Belgian coastal zone (Southern North Sea) over the past 50 years. *J. Mar. System* 64, 216–228.
- Lancelot, C., Thieu, V., Polard, A., Garnier, J., Billen, G., Hecq, W., Gypens, N., 2011. Cost assessment and ecological effectiveness of nutrient reduction options for mitigating *Phaeocystis* colony blooms in the Southern North Sea : An integrated modeling approach. *Sci. Total Environ.* 409, 2179–2191.
- Lancelot, C., Veth, C., Mathot, S., 1991. Modelling ice-edge phytoplankton bloom in the Scotia-Weddell sea sector of the southern ocean during spring 1998. *J. Mar. System* 2, 333–346.
- Landon, M., Rus, D., Harvey, F., 2001. Comparison of instream methods for measuring hydraulic conductivity in sandy streambeds. *Ground Water* 39 (6), 870–885.
- Lasserre, F., Razack, M., Banton, O., 1999. A gis-linked model for the assessment of nitrate contamination in groundwater. *J. Hydrol.* 224 (3-4), 81–90.
- Lautz, L., Kranes, N., Siegel, D., 2010. Heat tracing of heterogeneous hyporheic exchange adjacent to in-stream geomorphic features. *Hydrological Processes* 24, 3074–3086.
- Lautz, L., Siegel, D., 2006. Modeling surface and ground water mixing in the using MODFLOW and MT3D. *Advances in Water Resources* 29, 1618–1633.
- Lautz, L., Siegel, D., 2007. The effect of transient storage on nitrate uptake lengths in streams : an inter-site comparison. *Hydrological Processes* 21, 3533–3548.
- LaVenue, A., RamaRao, B., de Marsily, G., Marietta, M., 1995. Pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields 2. application. *Water Resour. Res.* 31 (3), 495–516.
- Ledoux, E., 1975. Programme NEWSAM : principe et notice d'emploi. Tech. rep., Centre d'Informatique Géologique, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Ledoux, E., 1980. Modélisation intégrée des écoulements de surface et des écoulements souterrains sur un bassin hydrologique. Ph.D. thesis, ENSMP, UPMC.
- Ledoux, E., Girard, G., de Marsily, G., Villeneuve, J., Deschenes, J., 1989. Spatially distributed modeling : conceptual approach, coupling surface water and groundwater. In : *Unsaturated flow in hydrologic modeling - theory and practice*, 435–454.
- Ledoux, E., Girard, G., Villeneuve, J., 1984. Proposition d'un modèle couplé pour la simulation conjointe des écoulements de surface et des écoulements souterrains sur un bassin hydrologique. *La Houille Blanche* 1-2, 101–110.
- Ledoux, E., Gomez, E., Monget, J., Viavattene, C., Viennot, P., Ducharne, A., Benoit, M., Mignolet, C., Schott, C., Mary, B., 2007. Agriculture and groundwater nitrate contamination in the Seine basin. The STICS-MODCOU modelling chain. *Sci. Total Environ.* 375, 33–47.
- Lee, D. R., 1977. A device for measuring seepage flux in lakes and estuaries. *Limnol. Oceanogr.* 22(1), 140–147.

- Lee, S.-C., Mehta, A., 1997. Cohesive Sediments. Wiley, Ch. Equilibrium hypsometry fine-grained shore profiles, pp. 429–437.
- Lemieux, J., Sudicky, E., 2010. Simulation of groundwater age evolution during the Wisconsinian glaciation over the Canadian landscape. *Environmental Fluid Mechanics* 10, 91–102.
- Lencastre, A., 1966. Manuel d'hydraulique générale. Collection du centre de recherches et d'essais de Chatou. Eyrolles.
- León, L., Soulis, E., Kouwen, N., Farquhar, G., 2001. Nonpoint source pollution : A distributed water quality modeling approach. *Water Research* 35 (4), 997–1007.
- Levassor, A., Ledoux, E., 1996. Programme NEWSAM - notice d'utilisation. Tech. rep., Centre d'Informatique Géologique, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Lewandowski, J., Angermann, L., Nützmann, G., Fleckenstein, J., 2011. A heat pulse technique for the determination of small-scale flow directions and flow velocities in the streambed of sand-bed streams. *Hydrological Processes* 25, 3244–3255.
- Li, Q., Unger, A., Sudicky, E., Kassenaar, D., Wexler, E., Shikaze, S., 2008. Simulating the multi-seasonal response of a large-scale watershed with a 3D physically-based hydrologic model. *J. Hydrol.* 357 (3-4), 317–336.
- Liang, D., Falconer, R., Lin, B., 2007. Coupling surface and subsurface flows in a depth averaged flood wave model. *J. Hydrol.* 337, 147–158.
- Liggett, J., Werner, A., Simmons, C., 2012. Influence of the first-order exchange coefficient on simulation of coupled surface-subsurface flow. *J. Hydrol.* 414-415, 503–515.
- Lin, G.-F., Chen, G.-R., 2006. An improved neural network approach to the determination of aquifer parameters. *J. Hydrol.* 316, 281–289.
- Lin, G.-F., Chen, L.-H., 2004. A spatial interpolation method based on radial basis function networks incorporating a semivariogram model. *J. Hydrol.* 288 (3-4), 288–298.
- Lindgren, G., Destouni, G., Darracq, A., 2007. Inland subsurface water system role for coastal nitrogen load dynamics and abatement responses. *Environ. Sci. Technol.* 41, 2159–2164.
- Liu, H., Hsu, N., Lee, T. H., 2009. Simultaneous identification of parameter, initial condition, and boundary condition in groundwater modelling. *Hydrological Processes* 23 (16), 2358–2367.
- Loague, K., Heppner, C., Abrams, R., Carr, A., VanderKwaak, J., Ebel, B., 2005. Further testing of the Integrated Hydrology Model (inhm) : event-based simulations for a small rangeland catchment located near Chickasha, Oklahoma. *Hydrological Processes* 19, 1373–1398.
- Loague, K., Heppner, C., Mirus, B., Ebel, B., Ran, Q., Carr, A., Beville, S., VanderKwaak, J., 2006. Physics-based hydrologic-response simulation : foundation for hydroecology and hydrogeomorphology. *Hydrological Processes* 20, 1231–1237.
- Loague, K., VanderKwaak, J., 2002. Simulating hydrological response for the R-5 catchment : comparison of two models and the impact of the roads. *Hydrological Processes* 16, 1015–1032.
- Loague, K., VanderKwaak, J., 2004. Physics-based hydrologic response : platinum bridge, 1958 Edsel, or useful tool. *Hydrological Processes* 18, 2949–2956.
- Loheide, S., Gorelick, S., 2007. Riparian hydroecology : A coupled model of the observed interactions between groundwater flow and meadow vegetation patterning. *Water Resour. Res.* 43 (7), 1–16.
- Loheide II, S., Gorelick, S., 2006. Quantifying stream-aquifer interactions through the analysis of remotely sensed thermographic profiles and in situ temperature histories. *Environ. Sci. Technol.* 40 (10), 3336–3341.

- Lotteau, M., 2010. Méthode d'inversion par estimation de flux successifs. Application au bassin versant des Avenelles. Tech. rep., MINES ParisTech - Centre de Géosciences.
- Lowry, C., Walker, J., Hunt, R., Anderson, M., 2007. Identifying spatial/variability of groundwater discharge in a wetland stream using a distributed temperature sensor. *Water Resour. Res.* 43 (10), W10408.
- Lukey, B., Sheffield, J., Bathurst, J., Hiley, R., Mathys, N., 2000. Test of the SHETRAN technology for modelling the impact of reforestation on badlands runoff and sediment yield at Draix, France. *J. Hydrol.* 235, 44–62.
- Lunn, R., Adams, R., Mackay, R., Dunn, S., 1996. Development and application of a nitrogen modelling system for large catchments. *J. Hydrol.* 174, 285–304.
- Luzio, M. D., Arnold, J., 2004. Formulation of a hybrid calibration approach for a physically based distributed model with NEXRAD data input. *J. Hydrol.* 298, 136–154.
- Lyon, S., Seibert, J., Lembo, A., Walter, M., Steenhuis, T., 2006. Geostatistical investigation into the temporal evolution of spatial structure in a shallow water table. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 10 (1), 113–125.
- Macpherson, G., Sophocleous, M., 2004. Fast ground-water mixing and basal recharge in an unconfined, alluvial aquifer, Konza LTER Site, Northeastern Kansas. *J. Hydrol.* 286, 271–299.
- Madsen, H., 2003. Parameter estimation in distributed hydrological catchment modelling using automatic calibration with multiple objectives. *Advances in Water Resources* 26, 205–216.
- Maier, H., Dandy, G., 2000. Neural networks for the prediction and forecasting of water resources variables : a review of modelling issues and applications. *Environmental Modelling and Software* 15, 101–124.
- Maier, H., Jain, A., Dandy, G., Sudheer, K., 2010. Methods used for the development of neural networks for the prediction of water resource variables in river systems : Current status and future directions. *Environmental Modelling and Software* 25, 891–909.
- Maître, V., Cosandey, A.-C., Desagher, E., Parriaux, A., 2003. Effectiveness of groundwater nitrate removal in a river riparian area : the importance of hydrogeological conditions. *J. Hydrol.* 278, 76–93.
- Majdalani, S., Ackerer, P., 2011. Identification of groundwater parameters using an adaptative multiscale method. *Ground Water* 49(4), 548–559.
- Malard, F., Tockner, K., Dole-Olivier, M.-J., Ward, J. V., 2002. A landscape perspective of surface-subsurface hydrological exchanges in river corridors. *Freshwater Biology* 47, 621–640.
- Marcé, R., Comerma, M., García, J., Armengo, J., 2004. A neuro-fuzzy modeling tool to estimate fluvial nutrient loads in watersheds under time-varying human impact. *Limnol. Oceanogr. : Methods* 2, 342–355.
- Marmonier, P., Archambaud, G., Belaidi, N., Bougon, N., Breil, P., Chauvet, E., Claret, C., Cornut, J., Datry, T., Dole-Olivier, M., Dumont, B., Flipo, N., Foulquier, A., Gérino, M., Guilpart, A., Julien, F., C.Maazouzi, Martin, D., Mermillod-Blondin, F., Montuelle, B., Namour, P., Navel, S., Ombredane, D., Pelte, T., Piscart, C., Pusch, M., Stroffek, S., Robertson, A., Sanchez-Pérez, J., Sauvage, S., Taleb, A., Wantzen, M., Vervier, P., 2012. The role of organisms in hyporheic processes : gaps in current knowledge, needs for future research and applications. *Ann. Limnol. - Int. J. Lim.* 48 (3), 253–266.
- Martin, J.-C., Lalleron, A., Ceaux, J., Izac, J., Joseph, B., Laporte, P., Jegou, J., Boucher, I. L., Guignat, S., Feret, M., Hugo, V., Brechenmacher, P., 2009. Carte piézométrique des basses eaux 2008 de la nappe de la Craie du Sêno-Turonien dans le bassin Loire-Bretagne. Rapport final. Tech. Rep. RP-5749-FR, BRGM, 33 p., 21 ill., 1 pl. h.t.
- Marzadri, A., Tonina, D., Bellin, A., 2011. A semianalytical three-dimensional process-based model for hyporheic nitrogen dynamics in gravel bed rivers. *Water Resour. Res.* 47, W11518.
- Marzadri, A., Tonina, D., Bellin, A., Vignoli, G., Tubino, M., 2010. Semianalytical analysis of hyporheic flow induced by alternate bars. *Water Resour. Res.* 46, W07531.

- Massei, N., Fournier, M., 2012. Assessing the expression of large-scale climatic fluctuations in the hydrological variability of daily Seine river flow (France) between 1950 and 2008 using Hilbert-Huang Transform. *J. Hydrol.* 448-449, 119-128.
- Massei, N., Laignel, B., Deloffre, J., Mesquita, J., Motelay, A., Lafite, R., Durand, A., 2010. Long-term hydrological changes of the Seine River flow (France) and their relation to the North Atlantic Oscillation over the period 1950-2008. *Int. J. Climatol.* 30 (14), 2146-2154.
- Matheron, G., 1970. La théorie des variables régionalisées et ses applications. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, cahiers du centre de morphologie mathématique, fasc. 5 Edition.
- Matheron, G., 1978. Estimer et choisir. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, cahiers du centre de morphologie mathématique, fasc. 7 Edition.
- Mau, D., Winter, T., 1996. Estimating ground-water recharge from streamflow hydrographs for a small mountain watershed in a temperate humid climate, New Hampshire, USA. *Ground Water* 35 (2), 291-304.
- Maxwell, R., Kollet, S., 2008. Quantifying the effects of three-dimensional subsurface heterogeneity on horizontal runoff processes using a coupled numerical, stochastic approach. *Advances in Water Resources* 31, 807-817.
- Maxwell, R., Miller, N., 2005. Development of a coupled land surface and groundwater model. *Journal of Hydrometeorology* 6, 233-247.
- Mazi, K., Koussis, A. D., Restrepo, P. J., Koutsoyiannis, D., 2004. A groundwater-based, objective-heuristic parameter optimisation method for a precipitation-runoff model and its application to a semi-arid basin. *J. Hydrol.* 290 (3-4), 243-258.
- McCallum, A., Andersen, M., Giambastiani, B., Kelly, B., Acworth, R. I., 2012a. River-aquifer interactions in a semi-arid environment stressed by groundwater abstraction. *Hydrological Processes* In press.
- McCallum, J., Cook, P., Berhane, D., Rumpf, C., McMahon, G., 2012b. Quantifying groundwater flows to streams using differential flow gaugings and water chemistry. *J. Hydrol.* 416-417 (0), 118-132.
- McCuen, R., Surbeck, C., 2008. An alternative to specious linearization of environmental models. *Water Research* 42, 4033-4040.
- McDonald, M., Harbaugh, A., 1988. MODFLOW, a modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model. *Technique of Water Resources Investigations of the US Geological Survey*, 586 p., Ch. Book 6.
- McDonald, M., Harbaugh, A., 2003. The History of MODFLOW. *Ground Water* 41 (2), 280-283.
- McLaughlin, D., Townley, L., 1996. A reassessment of the groundwater inverse problem. *Water Resour. Res.* 32 (5), 1131-1161.
- McLay, C., Dragten, R., Sparling, G., Selvarajah, N., 2001. Predicting groundwater nitrate concentrations in a region of mixed agricultural land use : a comparison of three approaches. *Environ. Pollut.* 115, 191-204.
- McMahon, P., Böhlke, J., 1996. Denitrification and mixing in a stream-aquifer system : effects on nitrate loading to surface water. *J. Hydrol.* 186, 105-128.
- Medina, A., Carrera, J., 2003. Geostatistical inversion of coupled problems : dealing with computational burden and different types of data. *J. Hydrol.* 281, 251-264.
- Meier, P., Medina, A., Carrera, J., 2001. Geostatistical inversion of cross-hole pumping tests for identifying preferential flow channels within a shear zone. *Ground Water* 39 (1), 10-17.
- Mekonnen, M., Hoekstra, A., 2011. The green, blue and grey water footprint of crops and derived crop products. *Hydrology and Earth System Sciences* 15, 1577-1600.
- Mermillod-Blondin, F., Creuze, M., Marmonier, P., Dole-Olivier, M.-J., 2000. Distribution of solutes, microbes and invertebrates in river sediments along a riffle-pool-riffle sequence. *Freshwater Biology* 44, 255-269.

- Meyerhoff, S., Maxwell, R., 2011. Quantifying the effects of subsurface heterogeneity on hillslope runoff using a stochastic approach. *Hydrogeology Journal* 19, 1515–1530.
- Miglio, E., Quarteroni, A., Saleri, F., 2003. Coupling of free surface and groundwater flows. *Computers & Fluids* 32, 73–83.
- Mirus, B., Ebel, B., Heppner, C., Loague, K., 2011a. Assessing the detail needed to capture rainfall-runoff dynamics with physics-based hydrologic response simulation. *Water Resour. Res.* 47, W00H10.
- Mirus, B., Ebel, B., Loague, K., Wemple, B., 2007. Simulated effect of a forest road on near-surface hydrologic response : Redux. *Earth Surface Processes and Landforms* 32, 126–142.
- Mirus, B., Loague, K., Cristea, N., Burges, S., Kampf, S., 2011b. A synthetic hydrologic-response dataset. *Hydrological Processes* 25, 3688–3692.
- Moatar, F., Gailhard, J., 2006. Water temperature behaviour in the River Loire since 1976 and 1881. *C. R. Geosciences* 338, 319–328.
- Moffett, K., Tyler, S., Torgersen, T., Menon, M., Selker, J., Gorelick, S., 2008. Processes controlling the thermal regime of saltmarsh channel bed. *Environmental Science & Technology* 42, 671–676.
- Moldan, F., Wright, R., 1998. Episodic behaviour of nitrate in runoff during six years of nitrogen addition to the NITREX catchment at Gardsjön, Sweden. *Environ. Pollut.* 102 (S1), 439–444.
- Molénat, J., Gascuel-Oudou, C., 2002. Modelling flow and nitrate transport in groundwater for the prediction of water travel times and of consequences of land use on water quality. *Hydrological Processes* 16, 479–492.
- Molénat, L., Gascuel-Oudou, C., Ruiz, L., Gruau, G., 2008. Role of water table dynamics on stream nitrate export and concentration in agricultural headwater catchment (France). *J. Hydrol.* 348, 363–378.
- Monteil, C., 2011. Estimation de la contribution des principaux aquifères du bassin-versant de la Loire au fonctionnement hydrologique du fleuve à l'étiage. Ph.D. thesis, MINES-ParisTech.
- Monteil, C., Flipo, N., Poulin, M., Habets, F., Krimissa, M., Ledoux, E., 2010. Assessing the contribution of the main aquifer units of the Loire basin to river discharge during low flows. In : XVIII International Conference on Computational Methods in Water Resources, Barcelona. <http://congress.cimne.com/cmwr2010/Proceedings/docs/p71.pdf>, p. 8p.
- Montreuil, O., Mérot, P., Marmonier, P., 2010. Estimation of nitrate removal by riparian wetlands and streams in agricultural catchments : effect of discharge and stream order. *Freshwater Biology* 55, 2305–2318.
- Morin, E., 2008. La méthode. Vol. 1. Opus Seuil.
- Mouhri, A., Flipo, N., Rejiba, F., de Fouquet, C., Bodet, L., Goblet, P., Kurtulus, B., Ansart, P., Tallec, G., Durand, V., Jost, A., 2013a. Designing a multi-scale sampling system of stream-aquifer interfaces in a sedimentary basin. *J. Hydrol.* 504, 194–206.
- Mouhri, A., Flipo, N., Rejiba, F., de Fouquet, C., Tallec, G., Bodet, L., Durand, V., Jost, A., Guérin, R., Ansart, P., 2012a. Stratégie d'échantillonnage des échanges nappe-rivière du bassin agricole de l'orgeval. Tech. rep., PIREN Seine.
- Mouhri, A., Flipo, N., Rejiba, F., Durand, V., Tallec, G., Kurtulus, B., de Fouquet, C., Jost, A., Bodet, L., 2011. Mise en place d'un dispositif expérimental multi-échelle pour quantifier les échanges nappe-rivière dans un système aquifère multicouche. In : Proceedings of GFHN-GEOFAN. p. 6p.
- Mouhri, A., Flipo, N., Rejiba, F., Goblet, P., Bodet, L., Tallec, G., Ansart, P., Jost, A., Durand, V., de Fouquet, C., 2013b. Investigations hydro-géophysiques et premières modélisations thermiques de la vallée des avenelles à l'interface cours d'eau-nappe. Tech. rep., PIREN Seine.
- Mouhri, A., Flipo, N., Saleh, F., 2012b. État de l'art sur les méthodes de caractérisation et de quantification des échanges nappe-rivière. Tech. rep., PIREN Seine.

- Moxey, A., White, B., 1998. NELUP : Some reflections on undertaking and reporting interdisciplinary river catchment modelling. *Journal of Environmental Planning and Management* 41, 397–402.
- Mukhopadhyay, A., 1999. Spatial Estimation of Transmissivity Using Artificial Neural Network. *Ground Water* 37, 458–464.
- Munz, M., Krause, S., Tecklenburg, C., Binley, A., 2011. Reducing monitoring gaps at the aquifer-river interface by modelling groundwater-surface water exchange flow patterns. *Hydrological Processes* 25, 3547–3562.
- Nash, J., Sutcliffe, J., 1970. River flow forecasting through conceptual models. Part I, a discussion of principles. *J. Hydrol.* 10, 282–290.
- Navarro, A., 1977. A modified optimization method of estimating aquifer parameters. *Water Resour. Res.* 13(6), 935–939.
- Nayak, P., Sudheer, K., Ragan, D., Ramasastri, K., 2004. A neuro-fuzzy computing technique for modeling hydrological time series. *J. Hydrol.* 291, 52–66.
- Neal, C., Bowes, M., Jarvie, H., Scholefield, P., Leeks, G., Neal, M., Rowland, P., Wickham, H., Harman, S., Armstrong, L., Sleep, D., Lawlor, A., Davies, C., 2012. Lowland river water quality : a new UK data resource for process and environmental management analysis. *Hydrological Processes* 26, 949–960.
- Neal, C., Heathwaite, A., 2005. Nutrient mobility within river basins : a European perspective. *J. Hydrol.* 304, 477–490.
- Neal, C., Jarvie, H., Love, A., Neal, M., Wickham, H., Harman, S., 2008. Water quality along a river continuum subject to point and diffuse sources. *J. Hydrol.* 350, 154–165.
- Neal, C., Neal, M., Reynolds, B., Maberly, S., May, L., Ferrier, R., Smith, J., Parker, J., 2005. Silicon concentrations in IUK surface waters. *J. Hydrol.* 304, 75–93.
- Némery, J., Garnier, J., 2007a. Origin and fate of phosphorus in the Seine watershed (France) : Agricultural and hydrographic P budgets. *J. Geophys. Res.* 112, G03012.
- Némery, J., Garnier, J., 2007b. Typical features of particulate phosphorus in the Seine estuary (France). *Hydrobiologia* 588, 271–290.
- Nemeth, M., Solo-Gabriele, H., 2003. Evaluation of the use of reach transmissivity to quantify exchange between groundwater and surface water. *J. Hydrol.* 274, 145–159.
- Neuman, S., Fogg, G., Jacobson, E., 1980. A statistical approach to the inverse problem of aquifer hydrology : 2. Case Study. *Water Resour. Res.* 16 (1), 33–58.
- Neuman, S., Yakowitz, S., 1979. A statistical approach for the inverse problem of aquifer hydrology 1. Theory. *Water Resour. Res.* 15 (4), 845–860.
- Norgaard, R., 2005. Bubbles in a back eddy : A commentary on "The origin, diagnostic attributes and practical application of coevolutionary theory". *Ecological Economics* 45, 362–365.
- Norouzi Banis, Y., Bathurst, J., Walling, D., 2004. Use of caesium-137 data to evaluate SHETRAN simulated long-term erosion patterns in arable lands. *HP* 18, 1795–1809.
- Noto, L., Ivanov, V., Bras, R., Vivoni, E., 2008. Effects of initialization on response of a fully-distributed hydrologic model. *J. Hydrol.* 352, 107–125.
- Nowinski, J., Cardenas, M., Lightbody, A., Swanson, T., Sawyer, A., 2012. Hydraulic and thermal response of groundwater-surface water exchange to flooding in an experimental aquifer. *J. Hydrol.* 472–473, 184–192.
- Nutbrown, D., 1975. Identification of parameters in a linear equation of groundwater flow. *Water Resour. Res.* 11(4), 581–588.

- Nyquist, J. E., Freyer, P. A., Toran, L., 2008. Stream bottom resistivity tomography to map ground water discharge. *Ground Water* 46 (4), 561–569.
- Ocampo, C., Oldham, C., Sivapalan, M., Turner, J., 2006a. Hydrological versus biogeochemical controls on catchment nitrate export : a test of the flushing mechanism. *Hydrological Processes* 20, 4269–4286.
- Ocampo, C., Sivapalan, M., Oldham, C., 2006b. Hydrological connectivity of upland-riparian zones in agricultural catchments : Implications for runoff generation and nitrate transport. *J. Hydrol.* 331, 643–658.
- Oehler, F., Durand, P., Bordenave, P., Saadi, Z., Salmon-Monviola, J., 2009. Modelling denitrification at the catchment scale. *Sci. Total Environ.* 407, 1726–1737.
- Osman, Y., Bruen, M., 2002. Modelling stream-aquifer seepage in an alluvial aquifer : an improved losing-stream package for MODFLOW. *J. Hydrol.* 264, 69–86.
- Pai, T., Wan, T., Hsu, S., Chang, T., Tsai, Y., Lin, C., Hu, H., Yu, L., 2009. Using fuzzy inference system to improve neural network for predicting hospital wastewater treatment plant effluent. *Computers and Chemical Engineering* 33, 1272–1278.
- Panday, S., Brown, N., Foreman, T., Bedekar, V., Kaur, J., Huyakorn, P., 2009. Simulating dynamic water supply streams in a fully integrated surface-subsurface flow and transport model. *Vadose Zone Journal* 8 (4), 858–872.
- Panday, S., Huyakorn, P. S., 2004. A fully coupled physically-based spatially-distributed model for evaluating surface/subsurface flow. *Advances in Water Resources* 27, 361–382.
- Pardo-Igúzquiza, E., Chica-Olmo, M., 2007. KRIGRADI : A cokriging program for estimating the gradient of spatial variables from sparse data. *Computers and Geosciences* 33, 497–512.
- Pardo-Igúzquiza, E., Chica-Olmo, M., Garcia-Soldado, M., Luque-Espinar, J. A., 2009. Using semivariogram parameter uncertainty in hydrogeological applications. *Ground Water* 47 (1), 25–34.
- Park, S.-Y., Choi, J., Wang, S., Park, S., 2006. Design of a water quality monitoring network in a large river system using the genetic algorithm. *Ecol. Model.* 199, 289–297.
- Park, Y.-J., Cornaton, F., Normani, S., Sykes, J., Sudicky, E., 2008. Use of groundwater lifetime expectancy for the performance assessment of a deep geologic radioactive waste repository : 2. Application to a Canadian Shield environment. *Water Resour. Res.* 44, W04407.
- Park, Y.-J., Sudicky, E., Panday, S., Matanga, G., 2009. Implicit subtime stepping for solving nonlinear flow equations in an integrated surface-subsurface system. *Vadose Zone Journal* 8, 825–836.
- Parkin, G., Birkinshaw, S., Younger, P., Rao, Z., Kirk, S., 2007. A numerical modelling and neural network approach to estimate the impact of groundwater abstractions on river flows. *J. Hydrol.* 339, 15–28.
- Parkin, G., O'Donnell, G., Ewen, J., Bathurst, J., O'Connell, P., Lavabre, J., 1996. Validation of catchment models for predicting land-use and climate change impacts. 2. case study for a Mediterranean catchment. *J. Hydrol.* 175, 595–613.
- Partington, D., Brunner, P., Simmons, C., Therrien, R., Werner, A., Dandy, G., Maier, H., 2011. A hydraulic mixing-cell method to quantify the groundwater component of streamflow within spatially distributed fully integrated surface water-groundwater flow models. *Environmental Modelling and Software* 26 (7), 886–898.
- Pasquier, P., 2005. Résolution du problème inverse en hydrogéologie par une estimation successive des flux. Ph.D. thesis, Université de Montréal.
- Pasquier, P., Marcotte, D., 2006. Steady- and transient-state inversion in hydrogeology by successive flux estimation. *Advances in Water Resources* 29 (12), 1934–1952.
- Perrin, C., Michel, C., Andréassian, V., 2001. Does a large number of parameters enhance model performance ? Comparative assessment of common catchment model structures on 429 catchments. *J. Hydrol.* 242 (3-4), 275–301.

- Perrin, C., Michel, C., Andréassian, V., 2003. Improvement of a parsimonious model for streamflow simulation. *J. Hydrol.* 279, 275–289.
- Peyrard, D., Delmotte, S., Sauvage, S., Namour, P., Gerino, M., Vervier, P., Sanchez-Perez, J., 2011. Longitudinal transformation of nitrogen and carbon in the hyporheic zone of an N-rich stream : A combined modelling and field study. *Physics and Chemistry of the Earth* 36, 599–611.
- Peyrard, D., Sauvage, S., Vervier, P., Sanchez-Perez, J., Quintard, M., 2008. A coupled vertically integrated model to describe lateral exchanges between surface and subsurface in large alluvial floodplains with a fully penetrating river. *Hydrological Processes* 22, 4257–4273.
- Philippe, E., Habets, F., Ledoux, E., Goblet, P., Viennot, P., Mary, B., 2011. Improvement of the solute transfer in a conceptual unsaturated zone scheme : a case study of the Seine River basin. *Hydrological Processes* 25, 752–765.
- Pinder, G., Bredehoeft, J., Jr, H. C., 1969. Determination of Aquifer Diffusivity from Aquifer Response to Fluctuations in River Stage. *Water Resour. Res.* 5 (4), 850–855.
- Pinder, G., Jones, J., 1969. Determination of the groundwater component of peak discharge from the chemistry of total run-off. *Water Resour. Res.* 5 (2), 438–445.
- Platt, T., Denman, K., Jassby, A., 1977. The sea - Ideas and Observations on Progress in the Study of the Seas - Marine Modelling. Vol. 6. John Wiley and Sons, Ch. Modelling the productivity of phytoplankton, pp. 807–856.
- Poeter, E., Hill, M., 1997. Inverse models : A necessary next step in ground-water modeling. *Ground Water* 35 (2), 250–260.
- Polus, E., de Fouquet, C., Flipo, N., Poulin, M., 2010. Spatial and temporal characterization of "river water bodies". *Revue des Sciences de l'Eau / Journal of Water Science* 23 (4), 415–429.
- Polus, E., Flipo, N., de Fouquet, C., Poulin, M., 2011. Geostatistics for assessing the efficiency of distributed physically-based water quality model. Application to nitrates in the Seine River. *Hydrological Processes* 25 (2), 217–233.
- Polus-Lefebvre, E., 2010. Apports croisés de la modélisation géostatistique et déterministe - exemple des nitrates et de l'oxygène dissous dans un réseau hydrographique. Ph.D. thesis, MINES-ParisTech.
- Ponzini, G., Lozej, A., 1982. Identification of aquifer transmissivities : the comparison model method. *Water Resour. Res.* 18 (3), 597–622.
- Postma, D., Boesen, C., Kristiansen, H., Larsen, F., 1991. Nitrate reduction in an unconfined sandy aquifer : Water chemistry, reduction processes, and geochemical modeling. *Water Resour. Res.* 27 (8), 2027–2045.
- Poulin, M., Even, S., Billen, G., Mouchel, J.-M., Garnier, J., Levassor, A., Leviandier, T., 1998. La Seine en son bassin. Fonctionnement écologique d'un système fluvial anthropisé. Elsevier, Ch. Modèles : des processus au bassin versant, pp. 679–720.
- Pratihari, D., 2008. Soft Computing. Alpha Science International Ltd.
- Pretty, J., Hildrew, A., Trimmer, M., 2006. Nutrient dynamics in relation to surface-subsurface hydrological exchange in a groundwater fed chalk stream. *J. Hydrol.* 330, 84–100.
- Prommer, H., Barry, D., Zheng, C., 2003. MODFLOW/MT3D-based reactive multicomponent transport modelling. *Ground Water* 41 (2), 247–257.
- Prosser, I., Rustomji, P., 2000. Sediment transport capacity relations for overland flow. *Progress in Physical Geography* 24 (2), 179–193.
- Puckett, L., 2004. Hydrogeologic controls on the transport and fate of nitrate in ground water beneath riparian buffer zones : results from thirteen studies across the United States. *Water Science and Technology* 49 (3), 47–53.

- Puckett, L., Cowdery, T., McMahon, P., Tornes, L., Stoner, J., 2002. Using chemical, hydrologic, and age dating analysis to delineate redox processes and flow paths in the riparian zone of a glacial outwash aquifer-stream system. *Water Resour. Res.* 38 (8), 1134.
- Qu, Y., Duffy, C., 2007. A semidiscrete finite volume formulation for multiprocess watershed simulation. *Water Resour. Res.* 43, W08419.
- Quinn, P., Beven, K., Chevallier, P., Planchon, O., 1991. The prediction of hillslope flow paths for distributed hydrological modelling using digital terrain models. *Hydrological Processes* 5 (1), 59–79.
- Quintana-Seguí, P., Martin, E., Habets, F., Noilhan, J., 2009. Improvement, calibration and validation of a distributed hydrological model over France. *Hydrology and Earth System Sciences* 13, 163–181.
- Quintana-Seguí, P., Moigne, P. L., Durand, Y., Martin, E., Habets, F., Baillon, M., Canellas, C., Franchisteguy, L., Morel, S., 2008. Analysis of near-surface atmospheric variables : Validation of the SAFRAN analysis over France. *Journal of Applied Meteorology and Climatology* 47, 92–107.
- Rabalais, N., Turner, R., Díaz, R., Justić, D., 2009. Global change and eutrophication of coastal waters. *J. Mar. System* 66, 1528–1537.
- Ragueneau, O., Chauvaud, L., Leynaert, A., Thouzeau, G., Paulet, Y.-M., Bonnet, S., Lorrain, A., Grall, J., Corvaisier, R., Hir, M. L., Jean, F., Clavier, J., 2002. Direct evidence of a biologically active coastal silicate pump : Ecological implications. *Limnol. Oceanogr.* 47 (6), 1849–1854.
- Raisin, G., Bartley, J., Croome, R., 1999. Groundwater influence on the water balance and nutrient budget of a small natural wetland in Northeastern Victoria, Australia. *Ecological Engineering* 12, 133–147.
- RamaRao, B., LaVenue, A., de Marsily, G., Marietta, M., 1995. Pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields 1. Theory and computational experiments. *Water Resour. Res.* 31 (3), 475–493.
- RamaRao, B., LaVenue, A., de Marsily, G., Marietta, M., 2000. Reply. *Water Resour. Res.* 36 (9), 2799–2803.
- Ran, Q., Heppner, C., VanderKwaak, J., Loague, K., 2007. Further testing of the integrated hydrology model (InHM) : multiple-species sediment transport. *Hydrological Processes* 21, 1522–1531.
- Ran, Q., Loague, K., VanderKwaak, J., 2012. Hydrologic-response-driven sediment transport at a regional scale, process-based simulation. *Hydrological Processes* 26, 159–167.
- Rassam, D., Pagendam, D., Hunter, H., 2008. Conceptualisation and application of models for groundwater-surface water interactions and nitrate attenuation potential in riparian zones. *Environmental Modelling and Software* 23, 859–875.
- Redfield, A., Ketchum, B., Richards, F., 1963. The Sea. Ideas and Observations on Progress in the Study of the Seas. The Composition of the Sea-Water Comparative and Descriptive Oceanography. Vol. 2. Interscience Publishers, Ch. The influence of organisms on the composition of sea-water, pp. 26–77.
- Reed, S., Koren, V., Smith, M., Zhang, Z., Moreda, F., Seo, D.-J., DMIP Participants, 2004. Overall distributed model intercomparison project results. *J. Hydrol.* 298, 27–60.
- Refsgaard, J., 1997. Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models. *J. Hydrol.* 198, 69–97.
- Refsgaard, J., Henriksen, H., 2004. Modelling guidelines - terminology and guiding principles. *Advances in Water Resources* 27 (1), 71–82.
- Refsgaard, J., Knudsen, J., 1996. Operational validation and intercomparison of different types of hydrological models. *Water Resour. Res.* 32 (7), 2189–2202.
- Refsgaard, J., Seth, S., Bathurst, J., Erlich, M., Storm, B., Jrgensen, G., Chandra, S., 1992. Application of the SHE to catchments in india Part 1. General results. *J. Hydrol.* 140 (1-4), 1–23.

- Refsgaard, J., Sorensen, H., Mucha, I., Rodak, D., Hlavaty, Z., Bansky, L., Klucovska, J., Topolska, J., Takac, J., Kosc, V., Enggrob, H., Engesgaard, G., Jensen, J., Fiselier, J., Griffioen, J., Hansen, S., 1998. An integrated model for the Danubian lowland - methodology and applications. *Water Resour. Manage.* 12, 433–465.
- Refsgaard, J., Thorsen, M., Jensen, J., Kleetschulte, S., Hansen, S., 1999. Large scale modelling of groundwater contamination from nitrate leaching. *J. Hydrol.* 221, 117–140.
- Reggiani, P., Hassanizadeh, S., Sivapalan, M., Gray, W., 1999. A unifying framework for watershed thermodynamics : constitutive relationships. *Advances in Water Resources* 23, 15–39.
- Reggiani, P., Rientjes, T., 2010. Closing horizontal groundwater fluxes with pipe network analysis : An application of the REW approach to an aquifer. *Environmental Modelling & Software* 25, 1702–1712.
- Reggiani, P., Sivapalan, M., Hassanizadeh, S., 1998. A unifying framework for watershed thermodynamics : balance equations for mass, momentum, energy and entropy, and the second law of thermodynamics. *Advances in Water Resources* 22 (4), 367–398.
- Reichert, P., 1994. AQUASIM- a tool for simulation and data analysis of aquatic systems. *Water Science and Technology* 30 (2), 21–31.
- Reichert, P., Borchardt, D., Henze, M., Rauch, W., Shanahan, P., Somlyódy, L., Vanrolleghem, P., 2001. River Water Quality Model no.1. Tech. rep., IWA.
- Renard, F., Jeannée, N., 2008. Estimating transmissivity fields and their influence on flow and transport : The case of Champagne mounts. *Water Resour. Res.* 44, 1–12.
- Renard, P., 2007. Stochastic hydrogeology : What professionals really need ? *Ground Water* 45 (5), 531–541.
- Revelli, R., Boano, F., Camporeale, C., Ridolfi, L., 2008. Intra-meander hyporheic flow in alluvial rivers. *Water Resour. Res.* 44, W12428.
- Rihani, J., Maxwell, R., Chow, F., 2010. Coupling groundwater and land surface processes : Idealized simulations to identify effects of terrain and subsurface heterogeneity on land surface energy fluxes. *Water Resour. Res.* 46, W12523.
- Rinaldo, A., Bertuzzo, E., Botter, G., 2005. Nonpoint source transport models from empiricism to coherent theoretical frameworks. *Ecol. Model.* 184, 19–35.
- Rivest, M., Marcotte, D., Pasquier, P., 2008. Hydraulic head field estimation using kriging with an external drift : A way to consider conceptual model information. *J. Hydrol.* 361 (3-4), 349–361.
- Rivett, M., Buss, S., Morgan, P., Smith, J., Bemment, C., 2008. Nitrate attenuation in groundwater : A review of biogeochemical controlling processes. *Water Research* 42, 4215–4232.
- Rivoirard, J., 2012. De l'analyse structurale à la modélisation des ressources naturelles : contributions géostatistiques. Académie de Paris, Université Pierre et Marie Curie, mémoire des Sciences de la Terre.
- Roche, P.-A., Zimmer, D., 2006. Les eaux continentales. Institut de France - Académie des Sciences, Ch. Eau, aménagements et usages, pp. 9–102.
- Rode, M., Arhonditsis, G., Balin, D., Kebede, T., Krysanova, V., van Griensven, A., van der Zee, S., 2010. New challenges in integrated water quality modelling. *Hydrological Processes* 24, 3447–3461.
- Rosenberry, D., 2008. A seepage meter designed for use in flowing water. *J. Hydrol.* 359, 118–130.
- Rosenberry, D., Pitlick, J., 2009. Local-scale variability of seepage and hydraulic conductivity in a shallow gravel-bed river. *Hydrological Processes* 23, 3306–3318.
- Roth, C., Chilès, J.-P., de Fouquet, C., 1998. Combining geostatistics and flow simulators to identify transmissivity. *Advances in Water Resources* 21, 555–565.

- Rötting, T., Carrera, J., Bolzicco, J., Salvany, J., 2006. Stream-stage response tests and their joint interpretation with pumping tests. *Ground Water* 44 (3), 371–385.
- Roué-Le Gall, A., Poulin, M., Desbroas, D., Flipo, N., 2009. A physical-microbial food web coupled model to study the evolution of the ecological functioning of a new reservoir after its flooding (Sep, Puy de Dôme). *Ecol. Model.* 220, 841–856.
- Rouhani, S., Myers, D., 1990. Problems in Space-Time Kriging of Geohydrological Data. *Mathematical Geology* 22 (5), 611–623.
- Rousset, F., Habets, F., Gomez, E., Moigne, P. L., Morel, S., Noilhan, J., Ledoux, E., 2004. Hydrometeorological modeling of the seine basin using the SAFRAN-ISBA-MODCOU system. *J. Geophys. Res.* 109, D14105.
- Rozos, E., Efstratiadis, A., Nalbantis, I., Koutsoyiannis, D., 2004. Calibration of a semi-distributed model for conjunctive simulation of surface and groundwater flows. *Hydrological Sciences Journal* 49 (5), 819–842.
- Rubin, Y., Dagan, G., 1987. Stochastic identification of transmissivity and effective recharge in steady groundwater flow : 1. case study. *Water Resour. Res.* 23 (7), 1193–1200.
- Rushton, K., 2007. Representation in regional models of saturated river-aquifer interaction for gaining/losing rivers. *J. Hydrol.* 334, 262–281.
- Sadeghipour, J., Yeh, W. W.-G., 1984. Parameter identification of groundwater aquifer models : A generalized least squares approach. *Water Resour. Res.* 20(7), 971–979.
- Saenger, N., Kitanidis, P., Street, R., 2005. A numerical study of surface-subsurface exchange processes at a riffle-pool pair in the Lahn River, Germany. *Water Resour. Res.* 41, W12424.
- Sagar, B., Yakowitz, S., Duckstein, L., 1975. A direct method for the identification of the parameters of dynamic nonhomogeneous aquifers. *Water Resour. Res.* 11 (4), 563–570.
- Sahoo, G., Ray, C., Wade, H., 2005. Pesticide prediction in ground water in North Carolina domestic wells using artificial neural networks. *Ecol. Model.* 183, 29–46.
- Saint-Venant, B., 1871. Théorie du mouvement non permanent des eaux, avec application aux crues des rivières et à l'introduction des marées dans leur lit. [Comptes Rendus des Séances de l'Académie des Sciences. Paris.] 73, 147–154, 237–240.
- Saleh, F., 2010. Apport de la modélisation hydraulique pour une meilleure simulation des tirants d'eau et des échanges nappe-rivière à l'échelle régionale. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie.
- Saleh, F., Ducharne, A., Flipo, N., Oudin, L., Ledoux, E., 2013. Impact of river bed morphology on discharge and water levels simulated by a 1d saint-venant hydraulic model at regional scale. *J. Hydrol.* 476, 169–177.
- Saleh, F., Flipo, N., de Fouquet, C., 2012. Influence de la méthode d'estimation des niveaux d'eau dans un réseau hydrographique sur la quantification des échanges nappe-rivière. Tech. rep., PIREN Seine.
- Saleh, F., Flipo, N., Habets, F., Ducharne, A., Oudin, L., Poulin, M., Viennot, P., Ledoux, E., 2010. Contribution of 1D river flow modeling to the quantification of stream-aquifer interactions in a regional hydrological model. In : XVIII International Conference on Computational Methods in Water Resources, Barcelona. <http://congress.cimne.upc.es/cmwr2010/Proceedings/docs/p60.pdf>, p. 8p.
- Saleh, F., Flipo, N., Habets, F., Ducharne, A., Oudin, L., Viennot, P., Ledoux, E., 2011. Modeling the impact of in-stream water level fluctuations on stream-aquifer interactions at the regional scale. *J. Hydrol.* 400 (3-4), 490–500.
- Samani, N., Gohari-Moghadam, M., Safavi, A., 2007. A simple neural network model for the determination of aquifer parameters. *J. Hydrol.* 340, 1–11.
- Sawyer, A., Cardenas, M., 2009. Hyporheic flow and residence time distributions in heterogeneous cross-bedded sediment. *Water Resour. Res.* 45, W08406.

- Sawyer, A., Cardenas, M., Buttlers, J., 2011. Hyporheic exchange due to channel-spanning logs. *Water Resour. Res.* 47, W08502.
- Scanlon, B., Healy, R., Cook, P., 2002. Choosing appropriate techniques for quantifying groundwater recharge. *Hydrogeology Journal* 10 (1), 18–39.
- Scanlon, B., Mace, R., Barrett, M., Smith, B., 2003. Can we simulate regional groundwater flow in a karst system using equivalent porous media models? Case study, Barton Springs Edwards aquifer, USA. *J. Hydrol.* 276, 137–158.
- Schmidt, C., Bayer-Raich, M., Schirmer, M., 2006. Characterization of spatial heterogeneity of groundwater-stream water interactions using multiple depth streambed temperature measurements at the reach scale. *Hydrology and Earth System Sciences* 3 (4), 1419–1446.
- Schmidt, C., Conant, B., Bayer-Raich, M., Schirmer, M., 2007. Evaluation and field-scale application of an analytical method to quantify groundwater discharge using mapped streambed temperatures. *J. Hydrol.* 347, 292–307.
- Schoups, G., Hopmans, J., Young, C., Vrugt, J., Wallender, W., 2005. Multi-criteria optimization of a regional spatially-distributed subsurface water flow model. *J. Hydrol.* 311, 20–48.
- Schuetz, T., Weiler, M., 2011. Quantification of localized groundwater inflow into streams using ground-based infrared thermography. *Geophys. Res. Lett.* 38(3), L03401.
- Scibek, J., Allen, D., Cannon, A., Whitfield, P., 2007. Groundwater-surface water interaction under scenarios of climate change using a high-resolution transient groundwater model. *J. Hydrol.* 333, 165–181.
- Sebilo, M., 2003. Utilisation du traçage isotopique naturel pour caractériser et quantifier les processus de nitrification et de dénitrification à l'échelle du réseau hydrographique de la Seine. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
- Seitzinger, S., Mayorga, E., Bouwman, A., Kroeze, C., Beusen, A., Billen, G., Dreht, G. V., Dumont, E., Fekete, B., Garnier, J., 2010. Global river nutrient export : A scenario analysis of past and future trends. *Global Biogeochem. Cycles* 24, GB0A08.
- Seitzinger, S., Styles, R., Boyer, E., Alexander, R., Billen, G., Howarth, R., Mayer, B., Breemen, N. V., 2002. Nitrogen retention in rivers : model development and application to watersheds in the northeastern U.S.A. *Biogeochemistry* 57/58, 199–237.
- Selker, J., Thévenaz, L., Huwald, H., Mallet, A., Luxemburg, W., Van De Giesen, N., Stejskal, M., Zeman, J., Westhoff, M., Parlange, M., 2006. Distributed fiber-optic temperature sensing for hydrologic systems. *Water Resour. Res.* 42 (12), 8.
- Shan, Y., McKelvey, I. D., Hart, B. T., 1994. Determination of alkaline phosphatase-hydrolyzable phosphorus in natural water systems by enzymatic flow injection. *Limnol. Oceanogr.* 39 (8), 1993–2000.
- Sheibley, R., Duff, J., Jackman, A., Triska, F., 2003a. Inorganic nitrogen transformations in the bed of the Shingobee River, Minnesota : Integrating hydrologic and biological processes using sediment perfusion cores. *Limnol. Oceanogr.* 48 (3), 1129–1140.
- Sheibley, R., Jackman, A., Duff, J., Triska, F., 2003b. Numerical modeling of coupled nitrification-denitrification in sediment perfusion cores from the hyporheic zone of the Shingobee River, MN. *Advances in Water Resources* 26, 977–987.
- Shen, C., Phanikumar, M., 2010. A process-based, distributed hydrologic model based on a large-scale method for surface-subsurface coupling. *Advances in Water Resources* 33, 1524–1541.
- Shin, J., Kim, K.-H., Lee, K.-K., Kim, H.-S., 2010. Assessing temperature of riverbank filtrate water for geothermal energy utilization. *Energy* 35, 2430–2439.

- Shrestha, R. R., Rode, M., 2008. Multi-objective calibration and fuzzy preference selection of a distributed hydrological model. *Environmental Modelling and Software* 23, 1384–1395.
- Sincock, A., Wheeler, H., Whitehead, P., 2003. Calibration and sensitivity analysis of a river water quality model under unsteady flow conditions. *J. Hydrol.* 277, 214–229.
- Singh, R., Refsgaard, J., Yde, L., 1999. Application of irrigation optimisation system (IOS) to a major irrigation project in India. *Irrigation and Drainage Systems* 13, 229–248.
- Singh, V., Bhallamudi, S., 1998. Conjunctive surface-subsurface modeling of overland flow. *Advances in Water Resources* 21, 567–579.
- Singh, V. P., Woolhiser, D. A., 2002. Mathematical modeling of watershed hydrology. *American Society of Civil Engineers*.
- Sivapalan, M., Savenije, H., Blöschl, G., 2012. Socio-hydrology : A new science of people and water. *Hydrological Processes* 26 (8), 1270–1276.
- Slater, L., Ntarlagiannis, D., Day-Lewis, F., Mwakanyamale, K., Versteeg, E., Ward, A., Strickland, C., Johnson, C., Lane, J., 2010. Use of electrical imaging and distributed temperature sensing methods to characterize surface water-groundwater exchange regulating uranium transport at the hanford 300 area, washington. *Water Resour. Res.* 46 (10), 1–13.
- Sloan, W., Ewen, J., 1999. Modelling long-term contaminant migration in a catchment at fine spatial and temporal scales using the UP system. *Hydrological Processes* 13, 823–846.
- Smakhtin, V. U., 2001. Low flow hydrology : A review. *J. Hydrol.* 240 (3-4), 147–186.
- Smith, M., Seo, D.-J., Koren, V., Reed, S., Zhang, Z., Duan, Q., Morea, F., Cong, S., 2004. The distributed model intercomparison project (DMIP) : motivation and experiment design. *J. Hydrol.* 298, 4–26.
- Sogreah, 2004. Programme d'étude et de modélisation pour la gestion de la nappe du Cénomaniien, rapport de fin de phase 1. Tech. Rep. N° 273 0117-R2V2, AELB, 66 p., 11 fig., 4 tabl., 5 cartes, 8 ann.
- Sogreah, 2006. Programme d'étude et de modélisation pour la gestion de la nappe du Cénomaniien, rapport de fin de phase 2. Tech. Rep. N° 273 0117-R3V2, AELB, 58 p., 14 fig., 4 tabl., 14 cartes, 9 ann.
- Sonnenborg, T., Christensen, B., Nyegaard, P., Henriksen, H., Refsgaard, J., 2003. Transient modeling of regional groundwater flow using parameter estimates from steady-state automatic calibration. *J. Hydrol.* 273, 188–204.
- Sophocleous, M., 2002. Interactions between groundwater and surface water : the state of the science. *Hydrogeology Journal* 10 (2), 348.
- Sophocleous, M., Koelliker, J., Govindaraju, R., Birdie, T., Ramireddygar, S., Perkins, S., 1999. Integrated numerical modeling for basin-wide water management : The case of the Rattlesnake Creek basin in south-central Kansas. *J. Hydrol.* 214, 179–196.
- Sophocleous, M., Perkins, S., 2000. Methodology and application of combined watershed and ground-water models in Kansas. *J. Hydrol.* 236, 185–201.
- Sophocleous, M., Townsend, M., Vogler, L., McClain, T., Marks, E., Coble, G., 1988. Experimental studies in stream-aquifer interaction along the arkansas river in central kansas - field testing and analysis. *J. Hydrol.* 98 (3-4), 249–273.
- Soulsby, C., Petry, J., Brewer, M., Dunn, S., Ott, B., Malcolm, I., 2003. Identifying and assessing uncertainty in hydrological pathways : a novel approach to end member mixing in a Scottish agricultural catchment. *J. Hydrol.* 274, 109–128.
- Spalding, R., Exner, M., 1993. Occurrence of nitrate in groundwater - a review. *J. Environ. Qual.* 22, 392–402.

- Spanoudaki, K., Stamou, A., Nanou-Giannarou, A., 2009. Development and verification of a 3-D integrated surface water-groundwater model. *J. Hydrol.* 375, 410–427.
- Storey, R., Williams, D., Fulthorpe, R., 2004. Nitrogen processing in the hyporheic zone of a pastoral stream. *Biogeochemistry* 69, 285–313.
- Storey, R. G., Howard, K., Williams, D., 2003. Factors controlling riffle-scale hyporheic exchange flows and their seasonal changes in a gaining stream : A three-dimensional groundwater flow model. *Water Resour. Res.* 39-2, 1034.
- Storm, B., Jorgensen, G., Styczen, M., 1987. Simulation of water flow and soil erosion processes with a distributed physically-based modelling system. In : *Forest hydrology and watershed management*. Vol. 167. IAHS Publ, pp. 595–608.
- Streeter, H., Phelps, E. B., 1925. A study of the pollution and natural purification of the Ohio River. Tech. Rep. 146, U.S. Public Health Service, Treasury Department, Washington DC, public Health Bulletin.
- Struyf, E., Smis, A., Damme, S. V., Meire, P., Conley, D., 2009. The global biogeochemical silicon cycle. *Silicon* 1, 207–213.
- Sulis, M., Meyerhoff, S., Paniconi, C., Maxwell, R., Putti, M., Kollet, S., 2010. A comparison of two physics-based numerical models for simulating surface water-groundwater interactions. *Advances in Water Resources* 33, 456–467.
- Sulis, M., Paniconi, C., Rivard, C., Harvey, R., Chaumont, D., 2011. Assessment of climate change impacts at the catchment scale with a detailed hydrological model of surface-subsurface interactions and comparison with a land surface model. *Water Resour. Res.* 47, W01513.
- Sun, F., Shao, H., Kalbacher, T., Wang, W., Yang, Z., Huang, Z., Kolditz, O., 2011. Groundwater drawdown at Nankou site of Beijing Plain : model development and calibration. *Environ. Earth. Sci.* 64, 1323–1333.
- Sun, N.-Z., Yeh, W. W.-G., 1985. Identification of parameter structure in groundwater inverse problem. *Water Resour. Res.* 21(6), 869–883.
- Sun, N.-Z., Yeh, W. W.-G., 1992. A stochastic inverse solution for transient groundwater flow : Parameter identification and reliability analysis. *Water Resour. Res.* 28(12), 3269–3280.
- Sun, Y., Kang, S., Li, F., Zhang, L., 2009. Comparison of interpolation methods for depth to groundwater and its temporal and spatial variations in the Minqin oasis of northwest China. *Environmental Modelling and Software* 24 (10), 1163–1170.
- Ta'any, R., Tahboub, A., Saffarini, G., 2009. Geostatistical analysis of spatiotemporal variability of groundwater level fluctuations in Amman-Zarqa basin, Jordan : a case study. *Environ. Geol.* 57, 525–535.
- Tabuchi, J.-P., Blanchet, B., Esculier, F., Mouchel, J.-M., Poulin, M., Saison, O., 2013. Real-time control of paris area sanitation system based on seine river water quality/gestion en temps réel du système d'assainissement de la région parisienne en fonction de la qualité de la seine. In : *Proceedings of NOVATECH*.
- Takagi, T., M. Sugeno, M., 1985. Fuzzy identification of systems and its applications to modeling and control. *IEEE Trans. Systems Man and Cybernetics* 15 (1), 116–132.
- Tayfur, G., 2002. Applicability of sediment transport capacity models for nonsteady state erosion from steep slopes. *Journal of Hydrologic Engineering* 7 (3), 252–259.
- Teissier, S., Delmas, F., Améziame, T., Beuffe, H., Dalger, D., Dauta, A., Garabétian, F., Sauvage, S., Torre, M., Vervier, P., 1999. Evaluation de la capacité d'assimilation de l'hydrosystème Garonne à l'étiage - contribution à sa modélisation hydroécologique. Tech. rep., GIS ECOBAG.
- Theodossiou, N., Latinopoulos, P., 2006. Evaluation and optimisation of groundwater observation networks using the kriging methodology. *Environmental Modelling & Software* 21 (7), 991–1000.

- Therrien, R., McLaren, R., Sudicky, E., Panday, S., 2010. HydroGeoSphere : A three-dimensionnal numerical model describing fully-integrated subsurface and surface flow and solute transport. Tech. rep., Université Laval and University of Waterloo.
- Therrien, R., Sudicky, E., 2001. Well bore boundary conditions for variably saturated flow modeling. *Advances in Water Resources* 24, 195–201.
- Thierion, C., Habets, F., Ledoux, E., Viennot, P., Martin, E., Queguiner, S., Ackerer, P., Majdalani, S., Leblois, E., Lecluse, S., 2010. Modelling the surface water and ground water system of the Upper Rhine graben. In : XVIII International Conference on Computational Methods in Water Resources, Barcelona.
- Thierion, C., Longuevergne, L., Habets, F., Ledoux, E., Ackerer, P., Majdalani, S., Leblois, E., Lecluse, S., Martin, E., Queguiner, S., Viennot, P., 2012. Assessing the water balance of the Upper Rhine Graben hydrosystem. *J. Hydrol.* 424-425, 68–83.
- Thieu, V., Billen, G., Garnier, J., 2009. Nutrient transfer in three contrasting NW European watersheds : The Seine, Somme, and Scheldt Rivers. A comparative application of the Seneque/Riverstrahler model. *Water Research* 43, 1740–1754.
- Thieu, V., Billen, G., Garnier, J., Benoît, M., 2011. Nitrogen cycling in a hypothetical scenario of generalised organic agriculture in the Seine, Somme and Scheldt watersheds. *Reg. Environ. Change* 11, 359–370.
- Thieu, V., Garnier, J., Billen, G., 2010. Assessing the effect of nutrient mitigation measures in the watersheds of the Southern Bight of the North Sea. *Sci. Total Environ.* 408, 1245–1255.
- Thirel, G., Regimbeau, F., Martin, E., Noilhan, J., Habets, F., 2010. Short- and medium-range hydrological ensemble forecasts over France. *Atmos. Sci. Let.* 11, 72–77.
- Thompson, J., Sorensen, H., Gavin, H., Refsgaard, A., 2004. Application of the coupled MIKE SHE/MIKE 11 modelling system to a lowland wet grassland in southeast England. *J. Hydrol.* 293, 151–179.
- Thorsen, M., Refsgaard, J., Hansen, S., Pebesma, E., Jensen, J., Kleeschulte, S., 2001. Assessment of uncertainty in simulation of nitrate leaching to aquifers at catchment scale. *J. Hydrol.* 242, 210–227.
- Tian, F., Hu, H., Lei, Z., Sivapalan, M., 2006. Extension of the Representative Elementary Watershed approach for cold regions via explicit treatment of energy related processes. *Hydrology and Earth System Sciences* 10, 619–644.
- Tockner, K., Pusch, M., Borchardt, D., Lorang, M., 2010. Multiple stressors in coupled river-floodplain ecosystems. *Freshwater Biology* 55, 135–151.
- Tompson, A., Carle, S., Rosenberg, N., Maxwell, R., 1999. Analysis of groundwater migration from artificial recharge in a large urban aquifer : a simulation perspective. *Water Resour. Res.* 35 (10), 2981–2998.
- Tonina, D., Buffington, J. M., 2007. Hyporheic exchange in gravel bed rivers with pool-riffle morphology : laboratory experiments and three-dimensional modelling. *Water Resour. Res.* 43, W01421.
- Tóth, J., 1962. A Theory of Groundwater Motion in Small Drainage Basins in Central Alberta, Canada. *Journal of Geophysical Research* 67 (11), 4375–4387.
- Tóth, J., 1963. A Theoretical Analysis of Groundwater Flow in Small Drainage Basins. *Journal of Geophysical Research* 68 (16), 4795–4812.
- Tóth, J., 2002. József Tóth : An Autobiographical Sketch. *Ground Water* 40 (3), 320–324.
- Triska, F., Kennedy, V., Avanzino, R., Zellweger, G., Bencala, K., 1989. Retention and transport of nutrients in a third-order stream in northwestern California : Channel processes. *Ecology* 70, 1877–1892.
- Troldborg, L., Refsgaard, J., Jensen, K., Engesgaard, P., 2007. The importance of alternative conceptual models for simulation of concentrations in a multi-aquifer system. *Hydrogeology Journal* 15, 843–860.

- Turlan, T., Birgand, F., Marmonier, P., 2007. Comparative use of field and laboratory mesocosms for in-stream nitrate uptake measurement. *Ann. Limnol. - Int. J. Lim.* 43 (1), 41–51.
- Uehlinger, U., Bühner, H., Reichert, P., 1996. Periphyton dynamics in a floodprone prealpine river : evaluation of significant processes by modelling. *Freshwater Biology* 36, 249–263.
- Urquiza, J., N'Dri, D., Garon, A., Delfour, M., 2008. Coupling stokes and darcy equations. *Applied Numerical Mathematics* 58, 525–538.
- Van Breemen, N., Boyer, E., Goodale, C., Jaworski, N., Paustian, K., Seitzinger, S., Lajtha, K., Mayer, B., Dam, D. V., Howarth, R., and M. Eve, K. N., Billen, G., 2002. Where did all the nitrogen go? Fate of nitrogen inputs to large watersheds in the northeastern U.S.A. *Biogeochemistry* 57/58, 267–293.
- VanderKwaak, J. E., Loague, K., 2001. Hydrologic-response simulations for the R-5 catchment with a comprehensive physics-based model. *Water Resour. Res.* 37, 999–1013.
- Vannote, R., Minshall, G., Cummins, K., Sedell, J., Cushing, C., 1980. The river continuum concept. *Can. J. Fish. Aquat. Sci.* 37, 130–137.
- Vanrolleghem, P., Borchardt, D., Henze, M., Rauch, W., Reichert, P., Shanahan, P., Somlyódy, L., 2001. River Water Quality Model no.1 (RWQM1) : III biochemical submodel selection. *Water Science and Technology* 43 (5), 31–40.
- Varado, N., 2004. Contribution au développement d'une modélisation hydrologique distribuée. Application au bassin versant de la Donga, au Bénin. Ph.D. thesis, INPG.
- Vassena, C., Durante, C., Giudici, M., Ponzini, G., 2008. The importance of observations on fluxes to constrain ground water model calibration. *Physics and Chemistry of the Earth* 33, 1105–1110.
- Vázquez, R., Feyen, L., Feyen, J., Refsgaard, J., 2002. Effect of grid size on effective parameters and model performance of the MIKE-SHE code. *Hydrological Processes* 16, 355–372.
- Vazquez-Sune, E., Capino, B., Abarca, E., Carrera, J., 2007. Estimation of recharge from floods in disconnected stream-aquifer systems. *Ground Water* 45 (5), 579–589.
- Vemuri, V., Karplus, W. J., 1969. Identification of nonlinear parameters of ground water basins by hybrid computation. *Water Resour. Res.* 5(1), 172–185.
- Verley, F., Brunson, F., Verjus, P., Cholez, M., 2003. Nappe de Beauce - Piézométrie hautes eaux 2002. Tech. rep., DIREN Centre et Ile-de-France, Orléans, France.
- Vidal, J.-P., Martin, E., Franchistéguy, L., Baillon, M., Soubeyroux, J.-M., 2010a. A 50-year high-resolution atmospheric reanalysis over France with the Safran system. *Int. J. Climatol.* 30 (11), 1627–1644.
- Vidal, J.-P., Martin, E., Franchistéguy, L., Habets, F., Soubeyroux, J.-M., Blanchard, M., Baillon, M., 2010b. Multilevel and multiscale drought reanalysis over France with the Safran-Isba-Modcou hydrometeorological suite. *Hydrology and Earth System Sciences* 14, 459–478.
- Villeneuve, J., Hubert, P., Mailhot, A., Rousseau, A., 1998. La modélisation hydrologique et la gestion de l'eau. *Revue des Sciences de l'Eau* 11 (special), 19–39.
- Vilmin, L., 2011. Modélisation hydro-écologique de la seine – rapport de fin de première année. Tech. rep., Centre de Géosciences - MINES ParisTech.
- Vilmin, L., de Fouquet, C., Flipo, N., Poulin, M., 2013a. Reconstruction des conditions limites amont de PROSE par co-krigeage. Tech. rep., PIREN Seine.
- Vilmin, L., Flipo, N., Mouchel, J.-M., Grouz, N., Billen, G., Garnier, J., Poulin, M., de Fouquet, C., Groleau, A., Escoffier, N., 2013b. Modélisation du fonctionnement écologique de la seine : sensibilité des résultats aux processus hydro-sédimentaires. Tech. rep., PIREN Seine.

- Vilmin, L., Flipo, N., Poulin, M., 2012a. Le modèle de simulation biogéochimique C-RIVE. Tech. rep., PIREN Seine.
- Vilmin, L., Flipo, N., Poulin, M., Billen, G., de Fouquet, C., Groleau, A., Garnier, J., 2012b. Sensibilité du modèle PROSE aux paramètres d'érosion de la matière en suspension : Application à la simulation du phosphore. Tech. rep., PIREN Seine.
- Vinten, A., Dunn, S., 2001. Assessing the effects of land use on temporal change in well water quality in a designated nitrate vulnerable zone. *Sci. Total Environ.* 265, 253–268.
- Violette, S., Ledoux, E., Goblet, P., Carbonnel, J.-P., 1997. Hydrologic and thermal modeling of an active volcano : the Piton de la Fournaise, Reunion. *J. Hydrol.* 191, 37–63.
- Vogt, T., Hoehn, E., Schneider, P., Freund, A., Schirmer, M., Cirpka, O., 2010a. Fluctuations of electrical conductivity as a natural tracer for bank filtration in a losing stream. *Advances in Water Resources* 33 (11), 1296–1308.
- Vogt, T., Schneider, P., Hahn-Woernle, L., Cirpka, O., 2010b. Estimation of seepage rates in a losing stream by means of fiber-optic high-resolution vertical temperature profiling. *J. Hydrol.* 380 (1-2), 154–164.
- Vrugt, J., Schoups, G., Hopmans, J., Young, C., Wallender, W., Harter, T., Bouten, W., 2004. Inverse modeling of large-scale spatially distributed vadose zone properties using global optimization. *Water Resour. Res.* 40, W06503.
- Wade, A., Soulsby, C., Langan, S., Whitehead, P., Edwards, A., Butterfield, D., Smart, R., Cook, Y., Owen, R., 2001. Modelling instream nitrogen variability in the Dee catchment, NE Scotland. *Sci. Total Environ.* 265, 229–252.
- Wagener, T., Sivapalan, M., Troch, P., McGlynn, B., Harman, C., Gupta, H., Kumar, P., Rao, P., Basu, N., Wilson, J., 2010. The future of hydrology : An evolving science for a changing world. *Water Resour. Res.* 46, W05301.
- Walsh, C., Kilsby, C., 2007. Implications of climate change on flow regime affecting Atlantic salmon. *Hydrology and Earth System Sciences* 11 (3), 1127–1143.
- Wang, W., Kolditz, O., 2007. Object-oriented finite element analysis of thermo-hydro-mechanical (THM) problems in porous media. *Int. J. Numer. Meth. Engng* 69, 162–201.
- Wang, W., Kosakowski, G., Kolditz, O., 2009a. A parallel finite element scheme for thermo-hydro-mechanical (THM) coupled problems in porous media. *Computers and Geosciences* 35, 1631–1642.
- Wang, W., Li, J., Feng, X., Chen, X., Yao, K., 2011. Evolution of stream-aquifer hydrologic connectedness during pumping-experiment. *J. Hydrol.* 402 (3-4), 401–414.
- Wang, W.-C., Chau, K.-W., Cheng, C.-T., Qiu, L., 2009b. A comparison of performance of several artificial intelligence methods for forecasting monthly discharge time series. *J. Hydrol.* 374, 294–306.
- Ward, A., Fitzgerald, M., Gooseff, M., Voltz, T., Binley, A., Singha, K., 2012. Hydrologic and geomorphic controls on hyporheic exchange during base flow recession in a headwater mountain stream. *Water Resour. Res.* 48 (4).
- Ward, A., Gooseff, M., Singha, K., 2010. Characterizing hyporheic transport processes : Interpretation of electrical geophysical data in coupled stream-hyporheic zone systems during solute tracer studies. *Advances in Water Resources* 33 (11), 1320–1330.
- Weber, D., Englung, E., 1994. Evaluation and Comparison of Spatial Interpolators II. *Mathematical Geology* 26 (5), 589–604.
- Weill, S., Mazzia, A., Putti, M., Paniconi, C., 2011. Coupling water flow and solute transport into a physically-based surface-subsurface hydrological model. *Advances in Water Resources* 34, 128–136.

- Weill, S., Mouche, E., Patin, J., 2009. A generalized Richards equation for surface/subsurface flow modelling. *J. Hydrol.* 366 (1-4), 9–20.
- Wells, S., 2000. Hydrodynamic and water quality river basin modelling using CE-QUAL version3. In : Ibarra-Berastegi, G., Brebbia, C., Zannetti, P. (Eds.), *Development and Application of Computer Technics to Environmental Studies*. WIT Press Boston.
- Wen, X. H., Capilla, J. E., Deutsch, C. V., Gómez-Hernández, J. J., Cullick, A. S., 1999. A program to create permeability fields that honor single-phase flow rate and pressure data. *Computers & Geosciences* 25 (3), 217–230.
- Wen, X.-H., Deutsch, C., Cullick, A., 2002. Construction of geostatistical aquifer models integrating dynamic flow and tracer data using inverse technique. *J. Hydrol.* 255, 151–168.
- Weng, P., Sánchez-Pérez, J., Sauvage, S., Vervier, P., Giraud, F., 2003. Assessment of the quantitative and qualitative buffer function of an alluvial wetland : hydrological modelling of a large floodplain (Garonne River, France). *Hydrological Processes* 17, 2375–2392.
- Werner, A., Gallagher, M., Weeks, S., 2006. Regional-scale, fully coupled modelling of stream-aquifer interaction in a tropical catchment. *J. Hydrol.* 328, 497–510.
- Westhoff, M., Bogaard, T., Savenije, H. H. G., 2011. Quantifying spatial and temporal discharge dynamics of an event in a first order stream, using distributed temperature sensing. *Hydrology and Earth System Sciences* 15 (6), 1945–1957.
- Wetzel, R. G., 1983. *Limnology*, second edition. Saunders college publishing.
- White, D. S., 1993. Perspectives on defining and delineating hyporheic zones. *Journal of the North American Benthological Society* Vol. 12, No. 1, 61–69.
- Whiting, P., Pomeroy, M., 1997. A numerical study of bank storage and its contribution to streamflow. *J. Hydrol.* 202, 121–136.
- Wicks, J., Bathurst, J., 1996. SHESED : a physically-based, distributed erosion and sediment yield component for the SHE hydrological modelling system. *J. Hydrol.* 175, 213–238.
- Winder, N., McIntosh, B., Jeffrey, P., 2005. The origin, diagnostic attributes and practical application of co-evolutionary theory. *Ecological Economics* 54, 347–361.
- Winter, T., 1998. Relation of streams, lakes, and wetlands to groundwater flow systems. *Hydrogeology Journal* 7, 28–45.
- Woessner, W. W., 2000. Stream and fluvial plain ground water interactions : Rescaling hydrogeologic thought. *Ground Water* 38 (3), 423–429.
- Woldeamlak, S., Batelaan, O., Smedt, F. D., 2007. Effects of climate change on the groundwater system in the Grote-Nete catchment, Belgium. *Hydrogeology Journal* 15, 891–901.
- Wondzell, S., LaNier, J., Haggerty, R., 2009. Evaluation of alternative groundwater flow models for simulating hyporheic exchange in a small mountain stream. *J. Hydrol.* 364, 142–151.
- Wood, E., Roundy, J., Troy, T., van Beek, L., Bierkens, M., Blyth, E., de Roo, A., Döll, P., Ek, M., Famiglietti, J., Gochis, D., van de Giesen, N., Houser, P., Jaffé, P., Kollet, S., Lehner, B., Lettenmaier, D., Peters-Lidard, C., Sivapalan, M., Sheffield, J., Wade, A., Whitehead, P., 2011. Hyperresolution global land surface modeling : Meeting a grand challenge for monitoring Earth's terrestrial water. *Water Resour. Res.* 47, W05301.
- Wood, E., Roundy, J., Troy, T., van Beek, L., Bierkens, M., Blyth, E., de Roo, A., Döll, P., Ek, M., Famiglietti, J., Gochis, D., van de Giesen, N., Houser, P., Jaffé, P., Kollet, S., Lehner, B., Lettenmaier, D., Peters-Lidard, C., Sivapalan, M., Sheffield, J., Wade, A., Whitehead, P., 2012. Reply to comment by Keith J. Beven and Hannah L. Cloke on "Hyperresolution global land surface modeling : Meeting a grand challenge for monitoring Earth's terrestrial water". *Water Resour. Res.* 48, W01802.

- Woodbury, A., Smith, L., 1987. Simultaneous inversion of hydrogeologic and thermal data 1. Theory and application using hydraulic head data. *Water Resour. Res.* 23 (8), 1586–1606.
- Wool, T., Ambrose, R., Martin, J., and, E. C., 2001. Water Quality Analysis Simulation Program (WASP) version 6.0 - User's manual. Tech. rep., US EPA.
- Wriedt, G., 2004. Modelling of nitrogen transport and turnover during soil and groundwater passage in a small lowland catchment of northern Germany. Ph.D. thesis, Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH, Universität Postdam.
- Wriedt, G., Spindler, J., Geistlinger, H., Rode, M., 2005. Modelling the fate of nitrate in lowland catchment system. In : Heathwaite, L., Webb, B., Rosenberry, D., Weaver, D., Hayash, M. (Eds.), *Dynamics and Biogeochemistry of river corridors and wetlands*. Vol. 294. IAHS Publ, pp. 46–54.
- Wroblicky, G., Campana, M., Valett, H., Dahm, C., 1998. Seasonal variation in surface-subsurface water exchange and lateral hyporheic area of two stream-aquifer systems. *Water Resour. Res.* 34-3, 317–328.
- Wu, Y., Wang, W., Toll, M., Alkhoury, W., Sauter, M., Kolditz, O., 2011. Development of a 3D groundwater model based on scarce data : the Wadi Kafrein catchment / Jordan. *Environ. Earth. Sci.* 64, 771–785.
- Xia, R., Yen, B. C., 1994. Significance of averaging coefficients in open-channel flow equations. *J. Hyd. Eng.* 120 (2), 169–190.
- Xue, D., Botte, J., Baets, B. D., Accoe, F., Nestler, A., Taylor, P., Cleemput, O. V., Berglund, M., Boeckx, P., 2009. Present limitations and future prospects of stable isotope methods for nitrate source identification in surface- and groundwater. *Water Research* 43, 1159–1170.
- Yang, C., 1996. *Sediment transport theory and practice*. McGraw-Hill, New York.
- Yeh, W.-G., 1986. Review of parameter identification in groundwater hydrology : The inverse problem. *Water Resour. Res.* 22 (2), 95–108.
- Yeh, W.-G., Yoon, Y., 1981. Aquifer parameter identification with optimum dimension in parametrization. *Water Resour. Res.* 17 (3), 664–672.
- Yeh, W. W.-G., Tauxe, G. W., 1971. Optimal identification of aquifer diffusivity using quasilinearization. *Water Resour. Res.* 7(4), 955–962.
- Yuan, D., Lin, B., Falconer, R., 2008. Simulating moving boundary using a linked groundwater and surface water flow model. *J. Hydrol.* 349, 524–535.
- Zadeh, L., 1965. Fuzzy sets. *Information and Control* 8, 338–353.
- Zanchettin, C., Minku, F., Ludernir, T., 2005. Design of experiments in neuro-fuzzy systems. In : IEEE (Ed.), *Proceedings of the Fifth International Conference on Hybrid Intelligent Systems (HIS05)*.
- Zhang, G., Savenije, H., 2005. Rainfall-runoff modelling in a catchment with a complex groundwater flow system : application of the Representative Elementary Watershed (REW) approach. *Hydrology and Earth System Sciences* 9, 243–261.
- Zhang, X., Srinivasan, R., Zhao, K., Liew, M. V., 2009. Evaluation of global optimization algorithms for parameter calibration of a computationally intense hydrologic model. *Hydrological Processes* 23, 430–441.
- Zimmerman, D., de Marsily, G., Gotway, C., Marietta, M., Axness, C., Beauheim, R., Bras, R., Carrera, J., Dagan, G., Davies, P., Gallegos, D., Galli, A., Gomez-Hernandez, J., Grindrod, P., Gutjahr, A., Kitanidis, P., LaVenue, A., McLaughlin, D., Neuman, S., RamaRao, B., Ravenne, C., Rubin, Y., 1998. A comparison of seven geostatistically based inverse approaches to estimate transmissivities for modeling advective transport by groundwater flow. *Water Resour. Res.* 34(6), 1373–1413.
- Zimmerman, D., Pavlik, C., Ruggles, A., Armstrong, M., 1999. An Experimental Comparison of Ordinary and Universal Kriging and Inverse Distance Weighting. *Mathematical Geology* 31 (4), 375–390.