

#### Développement d'une stratégie de localisation d'une source de contaminants en nappe: mesures innovantes et modélisation inverse

Elyess Essouayed

#### ► To cite this version:

Elyess Essouayed. Développement d'une stratégie de localisation d'une source de contaminants en nappe : mesures innovantes et modélisation inverse. Sciences de la Terre. Université Michel de Montaigne - Bordeaux III, 2019. Français. NNT : 2019BOR30006 . tel-02127045

#### HAL Id: tel-02127045 https://theses.hal.science/tel-02127045

Submitted on 13 May 2019

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.







### THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ BORDEAUX MONTAIGNE

École Doctorale Montaigne Humanités (ED 480)

#### Discipline: Géoscience Spécialité: Hydrogéologie

présentée par

Elyess ESSOUAYED

pour obtenir le grade de:

#### Docteur de l'Université Michel de Montaigne

#### Développement d'une stratégie de localisation d'une source de contaminants en nappe : mesures innovantes et modélisation inverse

Directeur de thèse: M. Olivier ATTEIA

Soutenue le 8 Mars 2019 devant le jury composé de:

М.	Patrick GOBLET	Pr., Mines ParisTech	Président du jury
М.	Serge Brouyère	Dr., Université de Liège	Rapporteur
М.	Dominique GUYONNET	Dr., HDR, BRGM	Rapporteur
М.	Michael D. ANNABLE	Pr., Université de Floride	Examinateur
Mme	Rachel PECCI	Ingénieure, ERM	Examinateur
Mme	Nathalie GUISERIX	Ingénieure, Renault SAS	Invitée

# Résumé

De nombreux pays développés, à l'exemple de la France, ont connu et connaissent actuellement de nombreuses activités industrielles pouvant engendrer des contaminations dans les eaux souterraines sur des surfaces très réduites. Du fait de l'écoulement des eaux souterraines, ces pollutions menacent d'une part les milieux naturels environnants et d'autre part les personnes pouvant vivre à proximité. La gestion et la dépollution de ces sites contaminés peuvent être complexes et demandent un investissement important pour localiser les sources de contaminations, zones émettrices des flux de polluants les plus importants. Des techniques dites HRSC (High Resolution Site Caracterisation) ont été développées et sont de plus en plus utilisées afin de définir de manière efficace les caractéristiques du sous-sol, de décrire les hétérogénéités et donc de mieux localiser les sources. Néanmoins, les techniques HRSC utilisant une Geoprobe demandent un investissement économique important et ne sont pas adaptables à tous les sites (présence de gros graviers, de roches indurées ou contraintes dues aux machines dans une usine). D'autres méthodes ont ainsi été développées pour localiser les zones sources notamment à partir d'outils de mesures de flux ou de méthodes de modélisation. Des techniques opérationnelles existent afin de mesurer les flux de polluants indirectement dans les puits de forage, en combinant mesures de vitesses des eaux souterraines et mesures de concentrations en polluants. Ces outils existants présentent néanmoins de nombreuses contraintes sur le temps ou la fiabilité de la mesure.

L'un des premiers objectifs de la thèse a donc été de développer un outil innovant afin de mesurer la vitesse des eaux souterraines dans un puits. L'outil développé appelé DVT (« *Direct Velocity Tool* ») a permis de répondre aux différentes limites des outils existants et de mesurer des vitesses d'écoulement très lentes en seulement quelques minutes (5 - 10 minutes) sur une portion isolée de la crépine du puits. Le principe consiste à injecter de manière continue un traceur au niveau de la paroi crépinée. La concentration du mélange homogène (entre les eaux souterraines et traceur) est mesurée afin de déduire à partir d'une équation de mélange, la vitesse des eaux souterraines traversant le puits. En combinant le DVT avec une mesure locale des concentrations de polluants, il est possible de calculer le flux massique passant par le puits et ainsi définit plus précisément la portion de zone source conduisant au flux de polluants maximum. Des essais en laboratoire et des tests en site réels ont été réalisés.

L'autre partie de la thèse concerne la modélisation inverse pour la localisation de source. Ces 30 dernières années, plusieurs articles scientifiques décrivent l'utilisation de méthodes pour localiser une source de contaminants sur des cas synthétiques et plus rarement sur des cas réels. D'après la bibliographie, peu d'études traitent le sujet sur à la fois un champ de conductivité hydraulique et une dispersivité inconnue, ce qui est généralement proche d'une problématique de site réel. L'objectif a donc été de développer une stratégie de modélisation afin de localiser une source de contaminants et d'estimer les paramètres définissant les caractéristiques du domaine (champ de conductivité hydraulique et dispersivité longitudinale). Pour cela, l'étude s'est faite sur deux cas synthétiques en utilisant la méthode d'optimisation non linéaire de la suite PEST++, mettant en jeu l'algorithme de Gauss Marquardt Levenberg. Les codes MODFLOW et MT3DMS sont utilisés pour les simulations. Pour adapter les méthodes à une véritable gestion de sites pollués, une stratégie itérative globale est développée en imposant un ajout limité de nouvelles observations à chaque phase de modélisation. Cette stratégie est basée sur l'approche de type Data Worth, c'est à dire une analyse de la variance de la position de la zone source liée aux nouveaux points d'observation. Les positions de la source sur les deux cas synthétiques ont permis d'évaluer la méthode mise en place et de juger son applicabilité à une problématique réelle.

Dans la partie suivante, cette méthode est appliquée sur un site réel à partir de phases de mesures de vitesses au DVT et de concentrations. En amont de cette stratégie, une campagne de type Geoprobe a été réalisée au tout début de l'étude afin de comparer ces résultats avec la stratégie de localisation de source. L'optimisation non linéaire et le Data Worth ont permis de localiser les points de forage à mettre en place, tout en prenant en compte les différentes contraintes liées au site. La stratégie utilisée a permis de localiser une source avec des corrélations entre données observées et simulées acceptables. Néanmoins, en analysant plus précisément les résultats, le champ de conductivité hydraulique estimé par l'optimisation présente des anomalies éloignées de la réalité. De plus, des mesures au DVT et de concentrations ont permis d'évaluer les flux massiques de contaminants, mettant en valeur deux zones de flux distinctes. En analysant le ratio des polluants du site, il apparait que deux panaches sont potentiellement présents. Ainsi, une phase de modélisation a été lancée afin d'estimer (i) la présence potentielle de deux sources et (i)la chimie de la zone étudiée. L'optimisation a permis de localiser deux sources, avec (i) de bonnes corrélations entre données observées et simulées et (ii) un champ de conductivité hydraulique estimé beaucoup plus proche de la réalité. Les résultats de la statégie sont enfin comparés aux mesures Geoprobe qui a pu confirmer la présence d'une des deux sources identifiées.

# Abstract

In several developed countries, industrial activities caused contamination in groundwater on very small areas. With the groundwater flow, this contamination threatens the surrounding areas for the natural environment and for people living nearby. Contaminated sites management and remediation can be complex and require a significant investment to locate the contaminant source, which delivers the higher pollutant mass fluxes. High Resolution Site Characterization (HRSC) techniques have been developed and are being used more and more in order to define the characteristics of the site, to describe heterogeneities and thus to better localise the contaminant sources. However, HRSC techniques using a Geoprobe require a significant investment and are not available for all sites (coarse gravel, inducated rocks or accessibility in factory). Other methods have been developed to locate source contamination, in particular using mass flux measuring tools and/or modeling tools. Operational tools exist to measure pollutant mass fluxes indirectly in boreholes by combining Darcy flux and pollutant concentration measurements. Nevertheless these existing tools have many constraints on the duration time or the quality of measurement.

The first objectives of the thesis was to develop an innovative tool to measure groundwater veloticy in a well. The developed tool called DVT (Direct Velocity Tool) made it possible to measure Darcy flux in just a few minutes (5 - 10 minutes) in a well. The principle consists in a continuous injection of a tracer. The concentration of the homogeneous mix (between groundwater and tracer) is measured in order to deduce from a mixing equation the Darcy flux passing through the well. By combining the DVT with a local concentration measurement, it is possible to calculate the mass fluxes passing through wells. Laboratory and field tests were performed. Measurements with the DVT in the laboratory and in a real site compared to other velocity measurement tools confirm the good performance of the DVT.

The other part of the thesis concerns inverse modeling for source localisation. Over the last 30 years, several articles have described methods used to locate a contaminant source on synthetic cases and more rarely on real cases. Few studies considered the problem with an unknown hydraulic conductivity field and unknown dispersivity, which is generally the case of a real site problem. Therefore, the objective was to develop a modeling strategy to locate a source and to estimate the parameters defining the site characteristics (hydraulic conductivity field and longitudinal dispersivity). The study was done on two synthetic cases using a nonlinear optimisation method, involving the Gauss-Levenberg-Marquardt algorithm. The MODFLOW and MT3DMS codes are used for the simulations. To adapt the methods to a real management of contaminated sites, a global iterative strategy is developed by imposing a limited addition of new observations to each modeling phase. This strategy is based on the Data Worth (DW) approach, with an analysis of the source variance related to the new observation points. The correlation between observed and simulated data (hydraulic head and concentration) on the two synthetic cases made it possible to evaluate the implemented method and to assess its applicability to a real site problem.

This source localisation strategy is then applied to a real site with velocity (DVT) and concentrations measurements. Prior to this strategy, a Geoprobe campaign was conducted to compare these results with the source localisation strategy. The nonlinear optimisation implemented on site and the DW made it possible to locate the new wells (new observations), while taking into account the various constraints related to the site. The strategy used gave the source localisation with a high correlations between observed and simulated data. Nevertheless, by analyzing the results more precisely, the hydraulic conductivity field estimated by the optimisation did not correspond to reality. In addition, measurements with DVT and concentrations were used to evaluate mass fluxes of contaminants, highlighting two distinct zones of mass fluxes and improve the conceptual site model. Then, by analyzing the pollutant ratio of the site, it appears that two plumes are potentially present. Thus, an other inverse modeling phase has been tested to locate two potential sources. The optimisation made it possible to estimate the location of the two sources, with (i) a good correlations between observed and simulated data and (ii) a better estimation of hydraulic conductivity field closer to reality. Finally, the results of the Geoprobe campaign were used and confirmed the presence of the second source.

## Remerciements

Après tant d'années et tous les chemins que j'ai pu explorer, voilà enfin aujourd'hui le fruit de mon aboutissement qui vous est présenté, mais avant de rentrer dans le vif du sujet, j'aimerais remercier toutes les personnes qui ont participées de près ou de loin à ma réussite.

J'aimerais tout d'abord remercier les membres du jury, Monsieur Patrick Goblet pour son rôle de Président du jury, Messieurs Serge Brouyère et Dominique Guyonnet pour avoir accepté le rôle de rapporteurs du manuscrit, Madame Rachel Pecci ainsi que Monsieur Michael D. Annable pour le rôle d'examinateurs et Madame Nathalie Guiserix d'avoir accepté l'invitation à ma soutenance de thèse.

Je tiens tout particulièrement à remercier mon directeur de thèse Olivier Atteia, pour m'avoir fait confiance et soutenu durant ce projet passionnant. Promis, mon "ça va, ça va, tranquille!" sera de retour après la soutenance. Je remercie ensuite Marian, technicien de recherche chez Innovasol, qui a été présent à tout moment, que ce soit pour les problèmes techniques à l'atelier ou pour son aide lors de mes diverses campagnes de terrains. De même merci Sarah, pour tes réponses et ta disponibilité sur toutes les questions administratives que j'ai pu avoir. Je remercie aussi Jean-Louis et tous les membres du consortium Innovasol pour leur avis, conseils et diverses critiques lors des comités qui ont permis de faire avancer au mieux les travaux de thèse.

Merci à Greg pour sa patience et son aide sur certaines analyses réalisées durant le projet. Un grand merci à Elicia qui m'a aidé à plonger dans le bain de la modélisation inverse ainsi qu'à Alex pour son expérience sur ce sujet. Merci aussi à Yohann et Hugo pour leurs conseils sur PEST.

Merci aux anciens et nouveaux collègues de bureau, à Clément, pour ses conseils et les différents sujets plus ou moins scientifiques que l'on a pu avoir durant les deux premières années de thèse, à Chris qui a été présent la première année, et à Jeremy, pour les brefs débats sur nos girondins, qui je l'espère seront champion de France cette année.

Je remercie aussi mes anciens collègues de promo, Saspy, Constance, bon courage pour la fin de thèse, Julien, Béné, Jean, j'attends le prochain rendez-vous Vinayaka, et je n'oublie pas tous les autres qui ont été présents et avec qui on a passé de très bonnes années. Un grand merci à toutes les personnes du laboratoire, enseignants de l'EN-SEGID et toutes les personnes qui ont gravitées autour de moi, de mon bureau, du bâtiment D, Natacha, Isabelle, bientôt vous aussi votre nom entrera dans le Panthéon de la Hotte.

Je remercie aussi les ami(e)s, proches qui m'ont accompagné depuis tant d'années, musicalement parlant, à mon acolyte toujours présent Maxwell, Barbu, Djey pour nos premiers enregistrements, El Rouzico pour nos délires artistiques ou autres, tous les membres de l'ABC et les personnes présentes à tout moment, Asma, Nico, Dour, Yacine et Ludo.

Je tiens ensuite à remercier en particulier mes parents pour m'avoir soutenu et toujours accompagné durant toutes ces années d'étude, ces années de travail, fait de haut et de bas et donc fier aujourd'hui de vous rendre la pareil. Je remercie aussi ma sœur pour son soutien malgré la légère distance.

Enfin, je remercie profondément, celle qui a su percer ma bulle de thésard au quotidien, Rania, qui m'a écouté, supporté, remonté le moral et motivé, m'aidant à atteindre mes objectifs.

En vous souhaitant une bonne lecture.

# Table des Matières

$\mathbf{Li}$	iste des illustrations	ix	
$\mathbf{Li}$	Liste des tableaux xv		
1	Localisation d'une zone source de polluant : enjeux majeur d'un         site contaminé         1.1 Les sites et sols pollués en France         1.2 Problématiques liées aux zones sources de contaminants         1.3 Cadre de l'étude et problématique         1.4 Objectif de la thèse	1 2 2 7 8	
2	Mesure du flux massique de contaminants2.1Notion de flux massique et de bilan massique	<ol> <li>11</li> <li>12</li> <li>14</li> <li>17</li> <li>19</li> <li>22</li> <li>29</li> <li>33</li> </ol>	
3	Développement du Direct Velocity Tool (DVT) : un outil inno- vant pour la mesure des vitesses de Darcy et la mesure indirecte de flux massique3.1Fonctionnement du DVT3.2Modélisation du DVT dans un puits3.3Mesures à l'échelle du laboratoire3.4Mesures sur le site A3.5Mesures sur le site B3.6Conclusion3.7Utilisation du DVT dans la mesure du flux3.8Discussion	<b>35</b> 36 39 43 45 51 54 55 58	
4	Modélisation numérique pour la localisation d'une zone source :application sur cas synthétiques4.1La modélisation des eaux souterraines et du transport4.2État de l'art sur la localisation d'une source	<b>61</b> 62 64	

	$\begin{array}{c} 4.3 \\ 4.4 \\ 4.5 \\ 4.6 \end{array}$	Éléments théoriques et approche développée	69 76 81 87
<b>5</b>	App	lication de la stratégie de localisation de source sur site réel	97
	5.1	Objectifs	98
	5.2	Description du site d'étude	98
	5.3	Campagne de reconnaissance	104
	5.4	PHASE 1 : Campagne de terrain et construction du modèle 1	107
	5.5	PHASE 1 : Analyse GMLA et DW	116
	5.6	PHASE 2 : Campagne de terrain	119
	5.7	PHASE 2 : Analyse GMLA et DW    1	122
	5.8	PHASE 1/PHASE 2 : Discussions	124
	5.9	PHASE 3 : Amélioration du modèle conceptuel du site 1	126
	5.10	PHASE 4 : Mesures Geoprobe (MIP-HPT)	131
	5.11	Conclusion	133
6	Disc	cussion générale et conclusion 1	.37
	6.1	Synthèse des travaux réalisés sur la localisation de source 1	138
	6.2	Discussions et perspectives	139
	6.3	Conclusion générale	148
Ré	éférei	nces 1	51
$\mathbf{A}$	Para DV1	$lpha$ métrisation du modèle pour le calcul du coefficient $eta$ du $\Gamma$	.65
В	Cou sur	pes et caractéristiques des forages réalisés lors de la thèse le site d'étude 1	.69
С	Dist F1,	ribution verticale des concentrations en solvants chlorés sur F2, F3, P29, P32 et P23 lors de la campagne de mai 2018 1	.71

D Distribution verticale des concentrations en solvants chlorés sur F1, F2, F3, F5, F6, F7, P29 et P32 lors de la campagne de septembre 2018 173

# Liste des illustrations

$\begin{array}{c} 1.1 \\ 1.2 \end{array}$	Sites BASOL au janvier 2012. Source : MEDDE Comportement des LNAPL dans le milieu poreux avec P (phase flottante), D (phase dissoute) et G (phase gazeuse), d'après Lemière	3
1.3	et al. (2001) Comportement des DNAPL dans le milieu poreux avec P (phase plongeante), R (état résiduel) et G (phase gazeuse), d'après Lemière et al. (2001)	3
1.4	Relation entre débit massique sortant de la zone source et surface considérée sur trois sites d'après Guilbeault et al. (2005).	4 5
1.5	Extension du panache de DNAPL en fonction du niveau de dépol- lution d'après Falta et al. (2005).	6
1.6	Effet de l'épaisseur de LNAPL et du niveau de remédiation sur l'extension du panache d'après Huntley et Beckett (2002)	7
2.1	Différence entre le débit massique et le flux massique, extrait du rapport SERDP (2010). Lorsqu'un panache est à l'état permanent le débit massique traversant le transect B est égal à celui traversant	
2.2	A	12
2.3	Flux massiques différents pour une même concentration, schéma	14
2.4	Concentrations obtenues durant un pompage sur deux panaches différents d'après Bockelmann et al. (2001)	10
2.5	Méthode du PFM d'après Hatfield et al. (2004), Annable et al. (2005).	19
2.6	Préleveur ciblé INNOVASOL.	21
2.7	Méthode des transects avec vue 3D (Newell et al., 2003)	21
2.8	Description des écoulements préférentiels autour d'un puits grâce à un traceur (Drost et al., 1968). A droite, les particules d'eau sont	
	beaucoup plus perturbées du fait de la présence du massif filtrant.	22
2.9	Dispositif du colloidal borescope d'après Kearl et al. (1999)	24

2.10	Point Velocity Probe d'après Devlin et al. (2009)	25
2.11	In Well Point Velocity Probe d'après Osorno et al. (2018)	26
2.12	Comparaison sur 4 outils d'après Labaky et al. (2009)	27
2.13	Comparaison du PVP avec les méthodes classiques d'après Labaky	
	et al. $(2009)$	27
2.14	A gauche, $K$ est estimé à partir du HPT. Les valeurs estimées sont comparées avec les résultats obtenus au slug test représentés par les carrés rouges. A droite, les concentrations en COV mesurées à l'aide du MIP (courbe rouge) sont comparées aux concentrations mesurées dans l'eau (couleur bleu). Extrait de McCall et al. (2014).	32
3.1	<ul> <li>(a) Photographie du DVT dans un tube transparent. La partie en néoprène est plaquée contre le tube pour créer la fenêtre réservoir.</li> <li>(b) Vue est évectione du decrue leur du place en du DVT</li> </ul>	27
าา	(b) vue schematique du dessus iors du placage du DV1	31
3.2 3.3	Convergence des lignes de courant autour d'un puits conduisant	30
	au coefficient $\beta = \frac{d}{d'}$ .	40
3.4	Comparaison des coefficients $\beta$ modélisés sur trois cas	42
3.5	Coefficient $\beta$ du DVT en fonction de K aquifère pour des <i>vitesses</i>	
2.4	<i>de Darcy</i> d'un aquifère comprises entre 5 et 40 cm/jour	43
3.6	Caractéristiques de la <i>sandbox</i> utilisée pour la calibration du DVT.	44
3.7	Resultats des <i>vitesses de Darcy</i> mesurees au DV1 dans la bolte a	15
3.8	Photographie et caractéristiques des piézomètres utilisés pour le test en milieu contrôlé	43
3.9	Résultats des essais de traçage 1 et 2 montrant un pic de concen- tration 19 heures après l'injection. Les lignes pleines représentent	
	les valeurs modélisées sur TRAC.	49
3.10	Log du ratio de traceur en fonction du temps. La pente est calculé entre 0 et 60 minutes	51
3.11	Résultats des mesures de <i>vitesses de Darcy</i> avec le DVT, le PFM	51
9 19	et l'essai de traçage.	52
3.12	paraison DVT et PFM	52
3.13	Comparaison des mesures DVT et PFM sur site réel sur WA1, WA2, WA3 et WA4.	53
3.14	Comparaisons entre mesures directe de <i>vitesses de Darcy</i> au DVT et indirecte au PC	56
3.15	Comparaisons des mesures de flux massiques à partir de mesures indirectes (DVT+PC) et de mesures directes au PFM.	57
4.1	Schéma de la stratégie itérative adoptée pour la localisation de source	70
4.2	Approche de la méthode GMLA pour la localisation de source avec la Etape 0 et Etape 1	70 79
		• 4

4.3	Modèle de base du Cas A construit pour la localisation de source.	77
4.4	Adéquation entre données simulées et données observées lors de la	-
	Phase I du cas A. En bleu les données $H$ et en rouge les données $C$ .	79
4.5	Carte des incertitudes liées à $Y_s$ du cas A pour la Phase 1 et Phase	
	2. En noir, les ellipses délimitant les zones à forer là où le point	~ ~
	ajouté n'a aucune influence.	80
4.6	Adéquation entre données simulées et données observées lors de la	~~~
	Phase 2 du cas A. En bleu les données $H$ et en rouge les données $C$ .	80
4.7	Distribution a posteriori de $Y_s$ et $\alpha_L$ du cas A pour la Phase 1 et 2.	81
4.8	Modèle de base du Cas B construit pour la localisation de source.	82
4.9	Adéquation entre données simulées et données observées lors de la	
	Phase 1 du cas B. En bleu les données $H$ et en rouge les données $C$ .	83
4.10	Adéquation entre données simulées et données observées lors de la	
	Phase 2 du cas B. En bleu les données $H$ et en rouge les données $C$ .	85
4.11	Adéquation entre données simulées et données observées lors de la	
	Phase 3 du cas B. En bleu les données $H$ et en rouge les données $C$ .	85
4.12	Carte des incertitudes liées à $Y_s$ du cas B pour les trois phases. En	
	noir, les ellipses délimitant les zones à forer là où le point ajouté	
	n'a aucune influence.	86
4.13	Distribution a posteriori de $Y_s$ et $\alpha_L$ du cas B pour les trois phases.	86
4.14	Position du panache simulé (rouge) et du panache réel (bleu). No-	
	tons que le panache réel en bleu, tourne avant la zone de prélève-	
	ment autorisée, rendant difficile la localisation de source.	88
4.15	Comparaison du cas A entre le champ de $K$ réel, le champ de $K$	
	estimé lors de la phase finale et le champ de $K$ optimal si la source	
	et la dispersivité étaient connus. Les zones en pointillé représentent	
	les zones similaire entre les trois champs de $K$	90
4.16	Comparaison du cas B entre le champ de K réel, le champ de	
	K estimé lors de la phase finale et le le champ de K optimum si	
	la source et la dispersivité étaient connus. Les zones en pointille	0.1
	représentent les zones similaire entre les trois champs de $K$	91
5.1	Contexte générale du site d'étude	99
5.2	Zones polluées du site et piézomètres présents autour et au droit	00
0	de la zone 2 qui est la zone concernée. En rouge P11, piézomètre	
	présent sur la zone 2 mais bouché et inutilisable.	100
5.3	Historique du site d'étude. En vert, le bâtiment FF, délimitant la	
	surface où la source peut être retrouvée.	101
5.4	Historique des concentrations autour et au droit de la zone 2 1	103
5.5	Carte piézométrique approximative de la zone d'étude (lignes tracées	
	à la main)	104
5.6	Distribution verticale des concentrations en solvant chlorés sur les	
	piézomètres P29, P32 et P23. Les barres représentent les valeurs	
	moyennes suite au pompage de toute la colonne d'eau du pié-	
	zomètre associé.	105

5.7	Schéma conceptuel simplifié de la zone d'étude suite à la campagne de reconnaissance.	106
5.8	Emplacement des nouveaux piézomètres F1, F2, F3 et F4. En bleu	100
	les piézomètres initialement présents, en vert les nouveaux forages.	107
5.9	Carte piézométrique approximative de la zone d'étude suite à la campagne réalisée en mai 2018 (ligne tracée à la main)	109
5.10	Concentrations en solvants chlorés exprimé en $\mu$ mol.L <sup>-1</sup> (Somme molaire) lors de la campagne de mai 2018	110
5.11	Schéma conceptuel affiné suite à la campagne de forage et prélève- ment réalisé en Mars et Mai 2018	111
5.12	Structure du modèle utilisé.	112
5.13	Niveau piézométrique sur P29 de Juillet 2017 à Aout 2018. La légère augmentation à partir de 250 jours correspond au pic de	
	précipitations au mois de Mars et au mois de Juin 2018 représenté	
	par l'histogramme mais n'impacte pas grandement le niveau pie-	119
5 14	Bépartition des points pilotes sur le domaine d'étude. En rouge	119
0.14	la ligne de variation de $Y_{a}$ à un $X_{a}$ fixe égal à 590 m	114
5.15	Adéquation entre données simulées et données observées lors de la	111
0.20	Phase 1 sur le cas réel. En bleu les données $H$ et en rouge les	
	données $C$	116
5.16	Panache potentiel simulé lors de la calibration de la Phase 1. Le	
	cadre rouge correspond à la zone prise en compte pour l'analyse DW	117
5.17	Variogrammes directionnels de concentrations (en $x \text{ et } y$ ) modélisés	
	suite à la simulation du panache.	117
5.18	Carte des incertitudes liées à $Ys$ suite à la localisation de source	110
F 10	de la Phase I sur le cas réel.	118
5.19	Concentrations en solvants chlores exprime en $\mu$ mol.L <sup>-1</sup> (Somme molaire) lors de la Phase 2.	119
5.20	Comparaison des concentrations en solvants chlorés obtenues (en	
	$\mu$ mol.L <sup>-1</sup> ) directement après foration et un mois après sur F1, F2, F3, F5, F6 et F7	121
5.21	Adéquation entre données simulées et données observées lors de la	
	Phase 2. En bleu les données $H$ et en rouge les données $C$	122
5.22	Panache simulé lors de la calibration de la Phase 2. La source a	100
r 00	eté estimé à $Y_s = 634$ m	123
5.23	Carte des incertitudes liées à $Y_s$ après ajout des nouveaux forages.	123
5.24	Distribution a posteriori des parametres $Y_s$ et $\alpha_L$ lors de la Phase	194
5 95	$1 \in 2$	124
0.40	Phase 2	125
5.26	Vitesse de Darcy mesurées au DVT en fonction des vitesses de	
	Darcy simulées sur 8 piézomètres.	126

,	5.27	Flux massiques (somme molaire des solvants chlorés) indirectes calculés à partir du DVT et du prélèvement simple.	127
,	5.28	Répartition des concentrations en TCE et en cis DCE ( $\mu$ g.L <sup>-1</sup> ) sur	121
		septembre 2018	128
,	5.30	Adéquation entre données simulées et données observées lors de la Phase 3 sur le cas réel. En bleu les données $H$ et en rouge les	
		données $C$	129
,	5.29	Panaches simulés lors de la calibration Phase 3 afin de localiser deux sources. La position de la source 1 a été estimée à $Y_{s1} = 624$	
	F 91	m et celle de la source 2 à $Y_{s2} = 533$ m	129
ł	0.51	deux sources en Phase 3	130
•	5.32	Panaches de TCE et cDCE simulés au Nord de la zone impactant les piézomètres F7 et P29	131
1	5.33	Résultats obtenus lors de la campagne Geoprobe réalisée en Aout	101
		2017. Les résultats du MIP XSD et HPT sont entourée. L'étoile noire correspond au point G3, en rouge les deux zones sources	
		estimée par le GMLA.	132
(	6.1	Ensemble des graphiques représentant les RMSE des concentra-	
		tions $C$ et charges hydrauliques $H$ en fonction des $Y_s$ imposés ainsi que les écart-types des points pilotes des champs de $K$ associés aux	
	c o	$Y_s$ imposés	142
,	0.2	pour chaque phase et chaque cas. $\ldots$	143
(	6.3	Vitesses de Darcy simulées en Phase 2 et 3 du site réel en fonction des vitesses de Darcy mesurée au DVT	144
(	6.4	Logigramme pour la localisation de source.	147
	A.1	Vue du dessus de la discrétisation du modèle (distances en m)	166
	A.2	Vue approchée de la discrétisation du modèle aux abords du puits en présence du DVT	166
-	A.3	Discrétisation en z du modèle représentant les 15 cm de la fenêtre	105
		reservoir	107

# Liste des tableaux

$2.1 \\ 2.2 \\ 2.3$	Outils existants pour la mesure de <i>vitesses de Darcy.</i>	28 29 30
3.1 3.2 3.3 3.4	Résultats des essais de traçage	49 50 55 57
4.1	Récapitulatif des méthodes existantes pour la localisation de source (Hm : homogène, Ht : Hétérogène, C. : connu, I. : inconnu, Trans. : transitoire, Cont. : Continue)	68
4.2	Paramètres initiaux utilisés dans l'optimisation GMLA pour chaque groupe de paramètres et d'observations	84
4.3	Résultats obtenus des optimisations réalisées sur le cas A et B. Les valeurs entre parenthèses sont les paramètres a priori utilisées en	
4.4	début de chaque calibration	89 95
5.1	Concentrations en solvants chlorés durant les campagnes de Mars et Mai 2018. En vert, les campagnes de mai 2018 utilisées pour la	
5.2	modélisation	110 115
5.3	Concentrations en solvants chlorés durant les campagnes de Mai, Aout et Septembre 2018. En vert, les campagnes de septembre utilisées pour la modélisation	120
5.4	Récapitulatif des résultats sur la localisation de source sur site réel.	104
5.5	Entre parentnese les valeurs NRMSE	124
	Figure 5.29). $\ldots$	128

5.6	Résultats de la calibration du ratio cDCE/TCE réalisé sur la partie	
	nord de la zone 2	131

Chapitre 1

Localisation d'une zone source de polluant : enjeux majeur d'un site contaminé De nombreux pays développés, à l'exemple de la France, ont connu et connaissent actuellement plusieurs activités industrielles pouvant engendrer des contaminations sur des surfaces réduites. Le nombre de sites et sols pollués (SSP) identifiés dans le monde a augmenté durant les 60 dernières années. Ces pollutions menacent les milieux naturels environnants et les personnes pouvant vivre à proximité. La gestion de ces sites est donc une problématique fréquente pour ces pays, qui ont pris en considération ce problème seulement depuis une à deux décennies à l'exemple de la France.

#### 1.1 Les sites et sols pollués en France

En France, une base de données nommée BASOL a été mise en place, recensant les sites et sols pollués ou potentiellement pollués qui nécessitent l'action des pouvoirs publics à titre préventif ou curatif. Cette base de donnée, créée par le Ministère de l'Ecologie, du Développement Durable et de l'Energie (MEDDE), comporte 4142 sites pollués, présentés sur la Figure 1.1. Parmi tous ces sites inventoriés, plus de 21% sont en cours d'évaluation, 11% en cours de dépollution ou de réhabilitation, 55% sont traités avec restriction d'usage ou surveillance et 8% sont traités et libres de toute restriction. Ces SSP sont caractérisés par de fortes concentrations en contaminants sur des surfaces réduites. Ces pollutions ponctuelles sont dues aux anciennes infiltrations de substances polluantes, pour 60% dans les sols et 35% dans les eaux souterraines. La surveillance des eaux souterraines est donc cruciale pour les SSP, les pollutions dans les eaux souterraines étant très persistantes (dans le temps et l'espace) et très difficiles à contrôler et à traiter.

# 1.2 Problématiques liées aux zones sources de contaminants

#### 1.2.1 Définition

Suite à un déversement accidentel de produits purs en surface, la pollution peut traverser la zone non saturée (ZNS) avant d'arriver à la nappe d'eau souterraine. La quantité de contaminants qui ne sera pas retenue par la ZNS, s'accumulera au niveau du toit de la nappe (si pollution en LNAPL : *Light Non-Aqueous Phase Liquids*, cf. Figure 1.2) ou sur le mur de la nappe (si pollution en DNAPL : *Dense Non-Aqueous Phase liquids*, cf. Figure 1.3). Un horizon argileux dans l'aquifère peut aussi empêcher la descente complète du DNAPL.

C'est cette accumulation de LNAPL ou DNAPL sur une surface réduite de l'aquifère que nous appellerons zone source de contaminants. Ces zones sources sont en fait composées de phase organiques qui représentent souvent plus de 90% de la masse totale du produit pur. Du fait des écoulements naturels de l'aquifère, des flux de contaminants vont émaner de la source et vont créer un panache,



Figure 1.1 : Sites BASOL au janvier 2012. Source : MEDDE.



**Figure 1.2 :** Comportement des LNAPL dans le milieu poreux avec P (phase flottante), D (phase dissoute) et G (phase gazeuse), d'après Lemière et al. (2001).



Figure 1.3 : Comportement des DNAPL dans le milieu poreux avec P (phase plongeante), R (état résiduel) et G (phase gazeuse), d'après Lemière et al. (2001).

dépendant des caractéristiques (le plus souvent hétérogènes) hydrogéologiques et géologiques. Ce panache sera composé de la partie dissoute du produit.

#### 1.2.2 Traitement des eaux souterraines

La difficulté du traitement des eaux souterraines contaminées repose directement sur les caractéristiques hydrogéologiques du milieu et des caractéristiques du contaminant. En effet, du fait des hétérogénéités du milieu, associées aux problèmes de localisation de source, les techniques de traitement des eaux souterraines qui sont généralement mises en place sont peu efficientes. Une localisation des flux de contaminants les plus importants aide notablement à la localisation de la source (Einarson et Mackay, 2001). Guilbeault et al. (2005) ont présenté dans leur étude la distribution des flux et des quantités de NAPL dans les aquifères de type sableux. Ainsi, ils ont montré qu'entre 90 et 100% de la pollution est émise sur seulement 20% de la surface totale du site (exemple sur 3 sites d'étude sur la Figure 1.4). En effet, la mesure des flux de contaminants définit plus précisément la dynamique d'un panache et permet de trouver les zones les plus émettrices de polluants caractéristiques des zones sources. Une localisation de ces flux permettrait donc de cibler seulement 20% de la surface totale du site pollué, engendrant des coûts moins élevés pour une potentielle dépollution.



**Figure 1.4 :** Relation entre débit massique sortant de la zone source et surface considérée sur trois sites d'après Guilbeault et al. (2005).

#### 1.2.3 Intérêt du retrait de la source

Dans la littérature, l'influence du traitement de la source sur l'extension du panache de pollution est démontrée. A l'exemple de l'étude de Falta et al. (2005), qui en travaillant sur plusieurs sites, ont démontré que plus le pourcentage de retrait de la source de DNAPL est élevé, moins le panache (partie dissoute) s'étalera (Figure 1.5). De même pour les LNAPL (Figure 1.6), l'étude de Huntley et Beckett (2002) a montré d'une part l'influence de l'épaisseur de flottants, qui est proportionnelle au temps et à l'extension du panache. D'autre part, la Figure 1.6 montre aussi que lorsque la source est traitée, le panache est largement réduit autant sur la distance qu'au niveau du temps.



**Figure 1.5 :** Extension du panache de DNAPL en fonction du niveau de dépollution d'après Falta et al. (2005).



**Figure 1.6 :** Effet de l'épaisseur de LNAPL et du niveau de remédiation sur l'extension du panache d'après Huntley et Beckett (2002).

#### 1.3 Cadre de l'étude et problématique

Comme cité précédemment, le retrait de la source de contaminants est un enjeu majeur permettant de limiter l'extension du polluant dans les eaux souterraines devenant plus facile à maitriser. Néanmoins, ce retrait est possible seulement si la source est localisée de manière efficace. L'étude s'inscrit dans le cadre des travaux de recherche du consortium INNOVASOL notamment par le biais des industriels du consortium concernés par la problématique de localisation de source. Cette localisation reste aujourd'hui complexe d'un point de vue technique (i) d'une part, du fait des caractéristiques des sites contaminés ; (ii) et d'autre part d'un point de vue économique, du fait des outils demandant un investissement important pour être utilisés.

Cette complexité est généralement due à plusieurs paramètres :

- des milieux très hétérogènes et très difficiles à caractériser finement,
- un historique de contamination parfois non connu qui a perduré durant plusieurs années,
- la présence d'un nombre limité de points d'observations sur le site contaminé (pour les mesures de charges hydrauliques ou de contaminants),
- un budget souvent limité pour la caractérisation du site contaminé.

#### 1.4 Objectif de la thèse

L'objectif de la thèse est de mettre en place une stratégie innovante pour la localisation d'une source de contaminants en nappe. Pour répondre à cela, les travaux seront basés sur le développement de mesures in situ et d'une modélisation inverse afin d'être applicable sur site réel. Cet objectif devra être atteint en tenant compte de toutes les contraintes pouvant intervenir lors de la gestion d'un site pollué (techniques et économiques).

Le manuscrit se décompose en trois grandes parties avec (i) une première phase décrivant un outil développé durant la thèse permettant de mesurer les flux de Darcy dans un puits et indirectement les flux de contaminants, (ii) une deuxième phase axée sur le développement d'une stratégie de modélisation inverse pour la localisation de la source appliquée à deux cas synthétiques dans des conditions proches de sites réels, (iii) et une troisième phase évaluant l'application de la stratégie de localisation de source sur site réel avec l'apport des mesures de vitesses et de concentrations, et confrontée à une campagne Geoprobe©.

L'outil vitesse a été développé à partir d'essais en laboratoire, d'une modélisation et de tests en conditions réelles en comparaison avec d'autres outils. Celui-ci combiné à des mesures de concentrations, permet le calcul du flux de polluants passant par le puits pouvant donner des informations importantes sur les caractéristiques locales d'un site. Cet outil appelé DVT fait aujourd'hui l'objet d'un article scientifique publié en Open Access au Journal of Hydrology (Essouayed et al., 2018).

La stratégie de modélisation a été développée de façon à être applicable à un site réel. Ainsi, une stratégie globale de type itérative a été testée sur deux cas synthétiques en prenant en considération l'ajout de nouvelles données à différentes phases pour limiter les incertitudes sur la localisation de la source. Dans cette stratégie globale, l'objectif a été d'utiliser une méthode d'optimisation non linéaire (utilisation de PEST++) pour localiser la source. Une analyse du *Data Worth* est ensuite mis en place afin de cibler les nouvelles observations permettant de limiter les incertitudes sur la localisation de la source.

Cette stratégie de modélisation a ensuite été testée sur un site réel. Des mesures in situ de vitesses et de concentrations ont été aussi réalisées afin de connaitre les zones où les flux sont les plus importants, contraignant plus l'analyse. Les résultats de l'approche sont au final comparés à des mesures de type Geoprobe©.

Avant d'exposer les grandes parties du projet de thèse, le Chapitre 2, présente en premier lieu la littérature sur la mesure des flux massiques de contaminants. Cette donnée est une variable importante pour la caractérisation du site réel et de la localisation d'une source.

# Chapitre 2

# Mesure du flux massique de contaminants

#### 2.1 Notion de flux massique et de bilan massique

#### 2.1.1 Définitions

D'une manière générale, dans la gestion d'un site contaminé, ce sont les concentrations en polluants qui sont prises en compte. Néanmoins, comme cité dans le chapitre précédent, la mesure de flux de contaminants porte un plus grand intérêt notamment pour l'étude de la dynamique de la zone impactée (Einarson et Mackay, 2001). Le flux massique J correspond à la quantité de polluants transitant à travers une section en un temps donné. En intégrant ces flux massiques dans une zone donnée, il est possible ensuite de calculer le débit massique  $M_d$  (Figure 2.1).



**Figure 2.1 :** Différence entre le débit massique et le flux massique, extrait du rapport SERDP (2010). Lorsqu'un panache est à l'état permanent le débit massique traversant le transect B est égal à celui traversant A.

#### 2.1.2 Équations régissant le flux et le débit massique

#### Loi de Darcy

D'après Henry Darcy (1856), la loi de Darcy décrit les circulations de fluide au sein d'un milieu poreux en fonction des différences de charges hydrauliques et des caractéristiques intrinsèques du fluide et du milieu. En milieu homogène, le débit volumique Q correspond au débit existant dans le milieu poreux, permettant de caractériser l'écoulement des eaux souterraines à travers une surface donnée.

$$Q = K \ i \ A \tag{2.1}$$

avec :

- Q : débit volumique  $[L \ L^2 \ T^{-1}]$
- K : conductivité hydraulique  $[L T^{-1}]$
- $i = \frac{dh}{dl}$ : gradient hydraulique [L L<sup>-1</sup>]
- A : surface traversée par le fluide  $[L^2]$

#### Flux spécifique

Le flux spécifique q correspond au débit volumique rapporté à la section où s'écoule ce fluide  $[L T^{-1}]$ . Ce flux spécifique peut être appelé vitesse de Darcy, mais représente en réalité un flux. A noter que dans le mémoire, le flux spécifique sera exprimé comme étant la vitesse de Darcy avec :

$$q = \frac{Q}{A} = K \ i \tag{2.2}$$

#### Vitesse de pores

La vitesse de pore correspond à la vitesse d'écoulement dans le milieu poreux, elle est calculée en fonction du flux spécifique et de la porosité effective de transport.

$$V_p = \frac{q}{\omega} \tag{2.3}$$

avec :

- $V_p$ : vitesse de pore  $[L T^{-1}]$
- $\omega$  : porosité effective [-]

#### Flux massique et débit massique

À partir des écoulements en milieu poreux (vitesse de Darcy) et d'une concentration en polluant, le flux massique peut être calculé avec :

$$J = q \ C \tag{2.4}$$

avec :

- J : flux massique du polluant $[M \ L^{-2} \ T^{-1}]$
- C : concentration du polluant  $[M \ L^{-3}]$

Le débit massique s'exprime à partir de l'intégrale des flux massiques sur une surface  $A\ [L^2]$  donnée avec :

$$Md = \int J \ dA \tag{2.5}$$

# 2.2 Caractéristiques et incertitudes des flux et débits massiques

#### 2.2.1 Intérêt de la mesure du flux massique

La caractérisation d'un panache à l'aide des flux massiques est primordiale pour la gestion d'un site contaminé. Stroo et al. (2003) ont montré qu'en fonction du type d'aquifère, la réduction de la masse de la source en DNAPL entraine une réduction plus ou moins importante du débit massique. La Figure 2.2 montre que dans certains cas, le débit massique provenant de la source dans un aquifère hétérogène peut être diminué de manière importante en éliminant une quantité limitée de masse de la source (une réduction de 25% de la masse d'une source peut réduire d'environ 50% le débit massique, cf. courbe "A" sur la Figure 2.2). De plus, du fait de la dépendance directe des flux avec les caractéristiques du milieu (conductivité hydraulique), ceux-ci permettent de plus facilement identifier la dynamique de la zone contaminée.



**Figure 2.2 :** Réduction du débit massique de DNAPL en fonction de la masse de source réduite en fonction du type d'aquifère d'après Stroo et al. (2003). "A" correspond à un aquifère hétérogène (modèle), "B" correspond à un aquifère homogène (modèle), "C" correspond aux mesures réalisées sur un site réel (aquifère plus ou moins homogène).

Dans la littérature, il apparait que la mesure de ces flux massiques est de plus en plus utilisée pour caractériser le taux de dégradation d'un panache (Borden et al., 1997; Kao et Wang, 2001, 2000; King et al., 1999; Semprini et al., 1995) ou pour identifier et caractériser la source (Basu et al., 2006; Einarson et Mackay, 2001; Fraser et al., 2008; Guilbeault et al., 2005; King et al., 1999; Newell et al., 2011). L'intérêt principal de la mesure du flux ou du débit massique repose donc sur la connaissance de la dynamique du panache et de la puissance de la source afin d'établir une meilleure gestion du site. Schwede et Cirpka (2010) présentent trois méthodes pour l'estimation du débit massique avec la méthode de pompage dite *Integral Pump Test* (IPT) (Ptak et al., 2000), la mesure directe de flux à partir d'un outil appelé le *Passive Flux Meter* (PFM) et la méthode des transects à partir de mesures de concentrations (prélèvement multi-niveau ou moyen). D'autres techniques permettant aussi de mesurer les flux sont présentées dans les sections suivantes. Malgré ces méthodes existantes, le flux massique est toujours très difficile à mesurer et l'influence des facteurs provenant des hétérogénéités de la source ou de l'aquifère doivent être prise en compte pour l'analyse des incertitudes des flux (Cao et al., 2018; Li et al., 2007).

#### 2.2.2 Facteurs influençant le flux et le débit massique

La conductivité hydraulique K, le gradient hydraulique i et toutes actions mettant en jeu ces paramètres (pompage, recharge, variation saisonnière et épaisseur d'aquifère) jouent un rôle important dans la mesure du flux. De même, des variations de concentrations en contaminants, dues à une biodégradation ou une dilution venant de précipitations, jouent aussi un rôle sur la valeur du flux massiques. De plus, la conductivité hydraulique K, la concentration en contaminants C, le gradient hydraulique i peuvent varier dans le temps et surtout dans l'espace, ce qui influe fortement sur la valeur du flux massique (ITRC, 2010). La Figure 2.3 extrait du rapport ITRC, montre qu'avec une même concentration, les répercutions ne sont pas les mêmes en fonction des caractéristiques du milieu. Ainsi, un horizon présentant un sable graveleux avec une conductivité hydraulique plus importante, créera un flux massique plus important. Il existe donc une forte variabilité dans l'espace des flux massiques.

Des variations temporelles peuvent aussi exister. En effet, en fonction de l'état du panache, les flux massiques les plus importants ne seront pas forcément localisés dans les zones à forte conductivité hydraulique (Basu et al., 2008). Ceci est dû aux variabilités des concentrations C. Durant la phase d'expansion d'un panache, le flux du contaminants est directement lié à l'advection. Les concentrations en contaminants seront donc plus fortes dans les zones à K élevées. Suite au lessivage progressif de la zone source, il existe un transfert des concentrations maximales des zones de K élevées vers les zones de K faibles. Lorsque le panache est en régression, la concentration diminue dans les zones les plus perméables, ce qui entraine une augmentation du flux de contaminant dans les zones de faible K. Dans cette situation, C sera plus faible dans les zones à K élevées. Le transfert des concentrations se fera donc dans le sens inverse, des zones à faibles K vers les zones à K élevées, appelé le phénomène de *Back-diffusion*.

Tous ces facteurs jouent un rôle sur le flux massique qui est généralement estimé à l'aide de mesures locales (présence d'un nombre limité de piézomètres due aux contraintes économiques et/ou géologiques). Afin de quantifier les flux et des débits massiques sur un site donné, des méthodes d'interpolations existent.



**Figure 2.3 :** Flux massiques différents pour une même concentration, schéma extrait et changé d'après le rapport ITRC (2010).

#### 2.2.3 Estimation des débits massiques

Du fait des incertitudes associées, l'interpolation de mesures locales de flux massiques a été largement étudiée dans la bibliographie afin d'avoir une estimation plus précise des débits massiques. Des méthodes géostatistiques ont été utilisées pour l'échantillonnage multi-niveau à l'exemple de Li et al. (2007) et Schwede et Cirpka (2010) avec une approche de Monte Carlo ou Troldborg et al. (2010) et Cai et al. (2011) avec une approche de type Bayesienne.

Les incertitudes liées à ces interpolations ont été étudiées par plusieurs auteurs. Jarsjo et al. (2005) ont réalisé une analyse des incertitudes sur la méthode IPT pour délimiter la zone source. L'utilisation du pompage a permis de réduire les incertitudes en augmentant le volume d'échantillonnage. Béland-Pelletier et al. (2011) ont analysé les flux massiques mesurés à partir d'un échantillonnage multi-niveau et à partir de l'IPT. L'analyse s'est faite sur un site réel au Canada afin d'évaluer la source d'incertitudes sur chaque méthode. Ils ont montré que la mesure multi-niveau donne 67% d'incertitudes alors que la méthode de pompage donne environ 28% d'erreur. Chen et al. (2014) ont aussi comparé les incertitudes des flux massiques mesurées à partir de simples échantillonnages et à partir d'un pompage. Ils ont montré que la méthode de pompage donne une estimation des incertitudes de 1.3 à 16 fois moins élevées que la mesure de concentration ponctuelle. De ce fait, l'étude bibliographique semble montrer que la technique IPT est la plus efficace pour diminuer les incertitudes. Cette méthode est cependant rarement utilisée sur site réel en raison du problème des rejets.

Ces incertitudes sur les flux massiques peuvent aussi être analysées en fonction de la densité des points de mesures et en fonction de la donnée (C ou K). Kübert et Finkel (2006) ont démontré qu'une densité appropriée de points de mesures sur un transect peut diminuer les incertitudes sur le flux massique mais jusqu'à une certaine limite. En diminuant l'écart entre les points de mesures en x et l'intervalle des profondeurs en z, les erreurs ne sont pas forcément réduites. En fonction de l'échelle des hétérogénéités, l'augmentation du nombre de points de mesures ne réduit pas forcément les incertitudes sur le flux massique. Li et Abriola (2009) ont utilisé une méthode géostatistique pour sélectionner le nombre limites de piézomètres pour l'investigation. Ainsi, ils ont comparé une campagne d'investigation régulière (zone quadrillée) avec une campagne plus ciblée sur les zones d'intérêt montrant que les incertitudes diminuent de 50% avec une approche ciblée. Guilbeault et al. (2005) ont comparé la distribution des débits massiques sur trois sites pollués en solvants chlorés. Ainsi ils ont montré que pour un aquifère dont la conductivité hydraulique varie d'un ordre de grandeur ou moins, la majorité des incertitudes sont en relation directe avec l'hétérogénéité des concentrations. Ils ont montré que ces concentrations peuvent varier sur la distribution verticale tous les 30 cm avec des valeurs variant de 2 à 4 ordres de grandeur. De plus dans chacun des trois sites, ils ont pu démontrer qu'environ 80% du débit massique total se localise dans moins de 10% de la surface totale de la zone polluée.

L'étude bibliographique a permis de voir l'intérêt des mesures de flux massiques et toutes les incertitudes venant de mesures locales. D'un point de vue général, l'intérêt du flux massique porte principalement sur une meilleure caractérisation de la source de contaminants et donc une optimisation de la dépollution (Rønde et al., 2017). Dans la littérature, trois méthodes principales ressortent pour la mesures des flux massiques : l'*Integral Pump Test*, le *Passive Flux Meter* et les mesures ponctuelles (transects ou mesures traditionnelles dans un piézomètre). Ces méthodes peuvent être classées en deux catégories, les méthodes directes et les méthodes indirectes (Kübert et Finkel, 2006). Les méthodes directes correspondent aux mesures effectuées sur les flux de contaminants, contrairement aux méthodes indirectes qui nécessitent une mesure de concentrations et une mesure de *vitesse de Darcy* pour calculer les flux. Les deux parties suivantes présentes plus précisément ces méthodes directes et indirectes.

#### 2.3 Méthodes directes de mesures de flux et débits massiques

#### 2.3.1 Méthode de pompage dites Integral Pump Test (IPT)

L'Integral Pump Test (IPT) permet la capture d'une partie ou de la totalité d'un panache (Figure 2.4). Avec le débit de pompage et la quantité de polluant mesurée, le débit massique du panache est estimé (Bockelmann et al., 2001). Les
pompages peuvent durer plusieurs années et engendrer des coûts d'exploitation et de maintenance très importants.



**Figure 2.4 :** Concentrations obtenues durant un pompage sur deux panaches différents d'après Bockelmann et al. (2001).

Avantages : Si le pompage est bien adapté, il est possible de capter toute la masse de contaminants et de capter des zones impactées non connues.

Inconvénients : Néanmoins, les erreurs sont possibles en cas de pompage insuffisant ou trop élevé, il peut y avoir des pertes d'informations spatiales, pas d'écoulement naturel et augmentation des coûts pour le traitement des eaux.

La méthode IPT est souvent utilisée pour la mesure du débit massique dans la bibliographie à l'exemple de Jarsjo et al. (2005),Brooks et al. (2008a), Goltz et al. (2009), ITRC (2010), Béland-Pelletier et al. (2011), Chen et al. (2014).

## 2.3.2 Mesure quantitative avec le *Passive Flux Meter* (PFM)

Le Passive flux meter (PFM) (Hatfield et al., 2004) est un outil permettant de mesurer directement les flux massiques dans un puits. Le PFM est représenté par un cylindre perméable de charbon actif permettant à la fois de mesurer (i) la quantité de contaminants adsorbée par le charbon actif et (ii) la vitesse de Darcy. Le charbon actif est initialement chargé en traceurs dont le ratio de disparition après exposition du PFM dans le puits permet le calcul de la vitesse de Darcy. L'exposition peut aller d'une à plusieurs semaines en fonction des vitesses de Darcy réelles.



**Figure 2.5 :** Méthode du PFM d'après Hatfield et al. (2004), Annable et al. (2005).

Avantages : Le PFM s'installe directement dans un piézomètre et permet d'avoir une mesure de flux.

Inconvénients : Le PFM demande un temps d'exposition non négligeable (de 1 à 3 semaines) et ne donne qu'une mesure locale.

Le PFM est très largement cité et utilisé pour la mesure de flux massiques ou la mesure des *vitesses de Darcy* à l'exemple de Hatfield et al. (2004), Annable et al. (2005), Basu et al. (2006), Campbell et al. (2006), Cho et al. (2007), Klammler et al. (2007), Brooks et al. (2008b), Basu et al. (2009), Risk (2009), ITRC (2010), Klammler et al. (2012), Hatfield (2015) et Brooks et al. (2018).

# 2.4 Méthodes indirectes de mesures de flux et débits massiques

L'équation 2.4 montre que le flux massique dépend de la vitesse de Darcy q et de la concentration C en contaminants. Il est donc possible de déduire le flux massique indirectement en combinant une mesure de vitesse de Darcy et une mesure de concentrations. Les mesures de vitesse de Darcy sont plus complexes et sont présentées en partie 2.5. La mesure des concentrations demande un échantillonnage d'eau soit par une mesure moyenne (prélèvement moyen dans un piézomètre) soit par une mesure ciblée (prélèvements successifs de plusieurs horizons pour une distribution verticale des concentrations).

## 2.4.1 Techniques de mesures de concentrations

La mesure des concentrations se réalise en prélevant une quantité d'eau directement à l'aide d'une pompe dans le puits. Afin d'avoir une qualité des eaux représentatives du milieu poreux, il est conseillé de pomper trois fois le volume du puits avant d'échantillonner ces eaux (Norme ISO 5667-II-1993). Cette technique est adaptée pour un prélèvement moyen. Pour plus de précisions et afin d'avoir une distribution verticale des concentrations, il existe des techniques qui permettent de réaliser un échantillonnage multi-niveau. Plusieurs sociétés proposent des échantillonneurs multi-niveau à l'exemple du (i) *Westbay MP System* développé par Schlumberger, isolant un horizon à partir de packers, (ii) *Solinst Waterloo System* développé par Solinst Canada, qui utilise le même principe ou (iii)le *Water FLUTE System* développé par l'entreprise FLUTe. Une multitude d'outils de ce type existe sur le marché, prouvant l'importance de la caractérisation multi-niveau.

INNOVASOL propose un outil appelé le Préleveur Ciblé (PC) (Figure 2.6), qui a été utilisé pour les objectifs de la thèse. Le PC est composé de deux packers de 20 cm permettant d'isoler un horizon de 30 cm pour l'échantillonnage d'eau. De plus, une sonde de pression est installée entre les deux packers afin d'analyser le rabattement durant le pompage et ainsi avoir une estimation de la conductivité hydraulique K locale. Le PC permet ainsi d'avoir une distribution verticale des concentrations et de K sur un piézomètre donné. Ces concentrations associées à des vitesses de Darcy permettent d'avoir des flux massiques.

# 2.4.2 Estimation des débits massiques par la méthode des transects

La méthode des transects permet de caractériser l'extension verticale et horizontale du panache. Le transect correspond à un axe perpendiculaire au panache afin d'y réaliser un certain nombre de points de mesures. En mettant en place plusieurs transects parallèles (Figure 2.7), le panache de pollution peut être plus facilement caractérisé et identifié. De plus, comme vu dans la partie sur les incertitudes, il est possible de calculer les débits massiques par interpolation (krigeage, thiessen ou mass flux toolkit développé par l'Environnemental Security Technology Certification Program).

Avantages : Le transect donne une grande information spatiale, le débit naturel n'est pas modifié et l'eau de purge à traiter est limitée.

Inconvénients : Il peut exister des erreurs d'interpolation mais pour cela il faut adapter la résolution des points de mesures à l'hétérogénéité potentielle mais en généralement cela entraine des coûts élevés.

A l'opposé de la technique IPT, la méthode des transects associée à des



Figure 2.6 : Préleveur ciblé INNOVASOL.



Figure 2.7 : Méthode des transects avec vue 3D (Newell et al., 2003).

mesures de concentrations peut permettre de caractériser un site avec une meilleure résolution. De nombreuses études sur site réel, principalement aux États-Unis, mettent en place plusieurs transects et utilisent des nouvelles techniques de mesures (caractéristiques du milieu et quantité de polluants) qualifiées de haute résolution dite HRSC (*High Resolution Site Characterization*).

# 2.5 Mesures des flux spécifiques

## 2.5.1 Généralités

L'écoulement dans un aquifère peut être à certains endroits très complexe et difficile à décrire du fait du gradient hydraulique et des échanges entre couches de conductivités hydrauliques différentes.

Ces écoulements naturels sont aussi perturbés lors de la mise en place d'un puits, avec la présence du massif filtrant et de la crépine. La Figure 2.8 montre les écoulements préférentiels autour d'un puits avec et sans présence du massif filtrant. Ceci montre qu'il existe une différence entre l'écoulement naturel de l'aquifère et celui qui peut être mesuré dans le puits que l'on peut appeler "écoulement apparent". Le rapport entre l'écoulement apparent et l'écoulement réel due aux convergences des lignes de courant sera détaillé dans le Chapitre 3.



**Figure 2.8 :** Description des écoulements préférentiels autour d'un puits grâce à un traceur (Drost et al., 1968). A droite, les particules d'eau sont beaucoup plus perturbées du fait de la présence du massif filtrant.

L'écoulement apparent correspond donc aux eaux souterraines ayant traversées le massif filtrant et la crépine (Lamontagne et al., 2002). Le flux spécifique décrivant l'écoulement apparent dans le puits peut donc être supérieure au flux spécifique réel dans l'aquifère, si la crépine ne présente aucun défaut. En cas de colmatage de la crépine, il est possible d'avoir à l'inverse un flux spécifique inférieur dans le puits par rapport à sa valeur réelle. Ce paramètre est bien évidemment à prendre en compte lors des mesures de flux spécifique dans un piézomètre. Ces mesures de flux spécifiques sont aussi utiles pour un grand nombre de problématiques liées aux études hydrogéologiques. Elles peuvent être utilisées pour quantifier la recharge, estimer le temps de dépollution, dimensionner une barrière hydraulique et principalement caractériser les mouvements des eaux et des contaminants dans un aquifère (Devlin et al., 2009).

La méthode la plus directe pour quantifier le flux spécifique est l'essai de traçage. Néanmoins, plusieurs piézomètres doivent être à disposition pour observer la migration du traceur et cette méthode est tout de même limitée du fait du temps et du coût requis pour le test (Labaky et al., 2009). C'est pour ces raisons que différentes techniques ont été développées ces dernières années afin de caractériser ces flux spécifique en un point donné (dans le puits ou directement dans le milieu poreux). A noter que pour être cohérent sur l'ensemble de la thèse et comme cité précédemment, le terme "flux spécifique" sera remplacé par le terme *vitesse de Darcy* durant tous le mémoire.

## 2.5.2 Outils existants

#### Dilution Test

La première méthode trouvée dans la bibliographie basée sur une mesure dans un puits est le *Point Dilution Test* (Drost et al., 1968). La mesure de *vitesse de Darcy* consiste en une injection instantanée d'un traceur dans le puits. En considérant que l'écoulement est permanent et que le mélange entre l'eau du puits et le traceur est homogène, le taux de dilution est calculé. La dilution mesurée est proportionnelle à la *vitesse de Darcy* traversant le puits, permettant de calculer la *vitesse de Darcy* à un temps donné.

Dans cette approche, la présence d'un écoulement vertical peut perturber la mesure de vitesse. Un *Dilution Test* a été développé dans une section isolée du puits pour éviter l'influence du flux vertical (Palmer, 1993; Pitrak et al., 2007) tout en gardant un mélange homogène entre le traceur et l'eau du puits. Lamontagne et al. (2002), ont réalisé le test et considèrent que l'essai est terminé lorsque la concentration du mélange durant la dilution arrive à environ 25% de plus que la valeur initiale des eaux naturelles.

Du fait de la difficulté de la mise en place du *Point Dilution Test* et de la mesure de vitesse à un instant t, Brouyère et al. (2008) ont présenté une nouvelle approche pour analyser l'injection d'un traceur dans un puits afin de répondre à ces contraintes, le *Finite Volume Point Dilution Method* (FVPDM). Basé sur l'essai de dilution, le FVPDM permet de mesurer la *vitesse de Darcy* traversant le puits et de voir ces variations en fonction du temps. Plus récemment, Jamin et al. (2015) ont utilisé le FVPDM pour mesurer les *vitesses de Darcy* dans un aquifère fracturé de type granite.

#### Geoflometer

D'autres outils mesurant la *vitesse de Darcy* dans un puits ont aussi été développés à l'exemple du *Geoflometer* basé sur la transmission de chaleur à travers la crépine du puits (Kerfoot et Massard, 1985). Le moindre mouvement interstitiel des eaux créé une conductance thermique proportionnelle aux mouvements ce qui permet le calcul de la *vitesse de Darcy* (outil surtout efficace pour des vitesses supérieures à 50 cm.jour<sup>-1</sup>).

#### Colloidal Borescope

Le *Colloidal Borescope* (Kearl, 1997; Kearl et al., 1992, 1999) permet de visualiser en temps réel le mouvement des particules dans le puits à partir d'une caméra (Figure 2.9). La *vitesse de Darcy* calculée correspond à une moyenne des vitesses des particules captées par la caméra. Cet outil est plus efficace pour les fortes vitesses, c'est à dire à plus de 100 cm.jour<sup>-1</sup> (Korte et al., 2000).



Figure 2.9 : Dispositif du colloidal borescope d'après Kearl et al. (1999).

#### Laser Doppler Velocimeter

Le Laser Doppler Velocimeter (LDV) (Momii et al., 1993) se place dans le puits et mesure directement la vitesse de Darcy sur un plan réalisé par l'intersection de deux lasers. Les vitesses mesurées sont proches de 100 cm.jour<sup>-1</sup>.

L'intervalle de mesure des outils *Geoflometer*, *Colloidal Borescope et Laser Doppler Velocimeter*, va théoriquement de 1 à 100 000 cm.jour<sup>-1</sup>. Néanmoins, pour la mesure de faibles vitesses, les erreurs de mesures sur ces outils sont très élevées et moins reproductibles.

#### In Situ Permeable Flow Sensor

Contrairement aux outils cités précédemment, le In Situ Permeable Flow Sensor (Ballard, 1996) s'intègre directement dans le matériau poreux. L'outil utilise la température pour mesurer la vitesse de Darcy. La température est initialement uniforme dans le cylindre et ce sont les écoulements des eaux qui vont créer une distribution des températures au niveau du cylindre lorsque celui-ci est inséré dans le sol. La distribution de la température varie en fonction des écoulements permettant de mesurer des vitesses allant de 1 à 90 cm.jour<sup>-1</sup>.

#### Point Velocity Probe (PVP)

Tout comme le In Situ Permeable Flow Sensor, le Point Velocity Probe (Devlin et al., 2009; Labaky et al., 2007, 2009) est directement inséré dans le milieu poreux. Le PVP est composé de deux semi cylindres dont l'un est creux et contient le système d'injection et de détection. L'autre partie du cylindre est pleine et possède des rainures pour stabiliser la ligne d'injection. Un petit volume de traceur est introduit à travers le système. La vitesse du traceur est ensuite estimée par calcul en fonction du temps d'arrivée du traceur au niveau de l'un des détecteurs (Figure 2.10) permettant d'avoir la vitesse de Darcy.



Figure 2.10 : Point Velocity Probe d'après Devlin et al. (2009).

Une des limites des outils insérés dans le milieu poreux concerne la compaction du matériau poreux durant l'installation ce qui peut perturber les écoulements. De plus, l'insertion des outils dépend de la géologie et présente des difficultés lorsqu'il y a présence de galets ou de roches dures.

Début 2018, un nouvel outil adapté à la mesure dans un puits a été développé, se basant sur le PVP, appelé le IWPVP (*In Well Point Velocity Probe*). La Figure 2.11 montre la présence du IWPVP dans le puits avec 6 capteurs représentés par les points gris et l'injection représentée par le point rouge au centre. Le concept est le même, avec l'injection d'un traceur et la détection de ce même traceur à partir de différents capteurs.



Figure 2.11 : In Well Point Velocity Probe d'après Osorno et al. (2018).

## 2.5.3 Multicomparaison et avis sur l'existant

Labaky et al. (2009) ont confronté le PVP avec d'autres outils pour la mesure de vitesse de Darcy. Les essais ont été réalisés sur un site réel en milieu contrôlé dans lequel une vitesse de 20 cm.jour<sup>-1</sup> a été appliquée. Les résultats sont présentés sur les Figures 2.12 et 2.13. Le PVP a été comparé au *Geoflometer, Borescope et Dilution test*. L'intercomparaison a montré que le PVP et le *Geoflometer* donnent des résultats similaires avec des valeurs plus proches de la réalité pour le PVP. Au contraire, le *Dilution test* et le *Colloidal Borescope* surestiment les valeurs de vitesses d'un ordre de grandeur. Néanmoins, la Figure 2.13 démontre l'efficacité du PVP par rapport aux mesures verticales des vitesses corrélant avec l'essai de traçage (précision de la mesure plus grande pour le PVP).



Figure 2.12 : Comparaison sur 4 outils d'après Labaky et al. (2009).



**Figure 2.13 :** Comparaison du PVP avec les méthodes classiques d'après Labaky et al. (2009).

Le Tableau 2.1 récapitule les outils décrits dans les sections précédentes. En majorité, les outils développés permettent de mesurer les *vitesses de Darcy* directement dans le puits. D'après nos connaissances bibliographiques le *Borehole Dilution Test* semble être l'outil le plus utilisé pour la mesure des vitesses. Néanmoins, le temps de mesure pour la dilution peut être très élevé si la vitesse est faible (plus de 10 heures). Le PFM est lui de plus en plus utilisé, principalement pour la mesure des flux massiques de contaminants. De plus, le PFM demande une exposition d'une ou plusieurs semaines pour obtenir des résultats.

Darcy.
de
vitesses
de
mesure
. la
pour
ls existants
ıti.
õ
••
<b>2.1</b>
Tableau

Outil	Mesures	Mesures	Commentaires
	dans le puits	des directions	Commentaires
Dilution test	oui	non	Cité dans plus de 100 ar- ticles le plus utilisé au- jourd'hui mais mesure sur des temps longs
Laser Doppler Velocimeter	oui	non	Beaucoup moins utilisé
In situ permeable flow sensor	non	oui	Peu utilisé
Geoflometer	oui	oui	Très peu utilisé et peu d'articles
Colloidal Borescope	oui	oui	Très présent dans la bib- liographie mais efficace uniquement pour les vitesses élevées
Point Velocity Probe	non	oui	Outil récent et cité dans plus de 50 articles
In Well Point Velocity Probe	oui	oui	Le plus récent
Passive flux meter	oui	oui	Outil récent et cité dans plus de 100 articles et très utilisé

De ces outils et techniques existants et des différentes incertitudes liées à la mesure des flux massiques, ces dix dernières années, de plus en plus d'études (no-tamment aux Etat-Unis) utilisent ce qu'on appelle les mesures à haute résolution (HRSC). Ces mesures utilisent des outils en direct-push permettant d'avoir les caractéristiques du milieu et de la pollution autant dans le plan x et y du site que dans le plan z pour avoir une vision 3D des zones impactées. Ces techniques HRSC sont présentées en partie suivante.

# 2.6 Concept de caractérisation de site à haute résolution (HRSC)

# 2.6.1 Définitions et objectifs

Les mesures HRSC (*High Resolution Site Characterisation*), correspondent aux mesures de site à haute résolution à partir de techniques en direct-push. La nature du sous-sol est investiguée avec précision afin de pouvoir établir des liens entre les différentes lentilles et de décrire les hétérogénéités du sol de façon très détaillées. Les flux massiques seront mieux définis ce qui permettra d'obtenir une localisation plus précise de la zone source. Le modèle conceptuel réalisé sera potentiellement plus proche de la réalité et les mesures prises pour la dépollution du site seront plus efficaces. Comme vu dans les parties précédentes, le nombre de mesures HRSC à réaliser dépend fortement de l'échelle des hétérogénéités à prendre en compte. L'objectif est de pouvoir adapter une résolution selon chaque site n'entrainant ni un surcoût (trop haute résolution) ni un manque d'informations (trop faible résolution).

# 2.6.2 Outils et techniques utilisées

Le Tableau 2.2 ci-dessous est un inventaire des techniques pouvant être utilisées en fonction du type de données recherchées. Le Tableau 2.3 en page suivante décrit les différentes techniques HRSC existantes pour les mesures sur site.

Type de données	Nom de l'outil
Quantitatif	HPT-GWS, CPT, Waterloo
Qualitatif	HPT, MIP, OIP, PID

Tableau 2.2 : Type de données pour les outils en direct-push.

	Définition	Mesures hydrogéologiques	Mesures des con- taminants
OIP	<i>Optical Image Profiler</i> : profil vertical qualitatif sur la présence de contaminants	Non	NAPLs
MIP	<i>Membrane Interface Probe</i> : profil vertical qualitatif sur la présence de COV	Non	LNAPL/COV
HPT	<i>Hydraulic Profiling Tools</i> : donne un profil vertical hy- drostratigraphique grâce à une injection d'eau pendant le forage. Peut être combiné avec le MIP et le OIP	Charge hydraulique et $K$ (grâce à l'injection d'eau)	Non
CPT	Cone Penetrometer Testing : donne un profil vertical stratigraphique sur les propriétés du sol et indirectement sur $K$ , peut être combiné avec MIP et LIF	Charge hydraulique et $K$	Non
HPT-GWS	Idem que HPT et échantillonnage multi-niveau en plus	Charge hydraulique Perméabilité	NAPLs/COV
APS	Aquifer Profiling : rincipalement utilisé pour l'échantillonnage d'eau pour de petits intervalles, Conductivité, pH, Oxygène dissous	Charge hydraulique et K	NAPLs/COV

# 2.6.3 Techniques HRSC dans la bibliographique

McAndrews et al. (2003) ont testé le MIP pour définir un panache de solvants chlorés dans le Wyoming et le Tennessee (USA). Ces techniques ont de plus en plus été utilisées ces 20 dernières années et principalement depuis les années 2010. Meyer et al. (2014) ont utilisé le Westbay MLS sur un site dans le Wisconsin (USA) pour mesurer les conductivités hydrauliques verticales. Sur le même site, la même méthode de mesure a été utilisée et a été comparée à une séquence stratigraphique (Meyer et al., 2016). Afin d'avoir une description des contaminants à haute résolution, Adamson et al. (2014) ont utilisé le MIP sur un site militaire en Floride (USA) représenté par une géologie très hétérogène avec une conductivité hydraulique très faible.

McCall et al. (2014) ont testé le MIP-HPT-XSD, combinant des mesures HPT (*Hydraulic Profiling Tool*), PID (*Photo Ionisation Detector*) et XSD (*Halogen Specific Detector*). L'objectif a été de déployer le système sur un site contaminé au COV au Danemark afin d'évaluer la fiabilité de la mesure. Les auteurs ont comparé la technique HRSC avec les techniques traditionnelles (Cf. Figure 2.14). Du point de vue des caractéristiques hydrogéologiques, le HPT donne une estimation de K proche de celle estimée par Slug Test. De même pour les concentrations, les valeurs mesurées au MIP-XSD sont proches de celles mesurées dans l'eau, avec des concentrations allant jusqu'à 160 mg.L<sup>-1</sup> de COV. Néanmoins, les auteurs ont noté que le MIP-XSD avait du mal à détecter la contamination en CV et DCE pour des concentrations comprises entre 100 et 300  $\mu$ g.L<sup>-1</sup>.

Plus récemment, McCall et al. (2017) ont évalué l'utilisation du HPT-GWS, qui est un nouveau système permettant de combiner un échantillonnage multiniveau avec des mesures de pression et de conductivité électrique. L'outil a permis de localiser les zones d'eaux saumâtres dans l'aquifère et les zones de recharges de manière précise.

Sur le rapport réalisé par Tink Environmental et EPA (2017), les auteurs ont confronté le MIP-HPT avec des mesures classiques (lithologie, gaz du sol et échantillon d'eau) sur un site pollué en solvants chlorés. D'un point de vue lithologique le MIP-HPT n'a pas su reconnaitre les différentes strates du premier mètre étant de très faible conductivité hydraulique et très hétérogène. Mais une fois le mètre dépassé, le MIP-HPT a détecté un horizon de 20 cm de sable argileux à environ 2 m de profondeur grâce à une chute brutale de la valeur de pression du HPT et de la conductivité électrique. Cette chute est caractéristique d'une présence d'un horizon plus perméable par rapport à la lithologie moyenne de la zone. Ils ont pu également repérer le massif filtrant et la partie crépinée d'un des puits déjà en place en analysant la réponse du HPT lorsque celui-ci était proche de ce puits. Concernant la pollution en chlorés, d'un point de vue local, les mesures au MIP-HPT ont pu localiser sur un point, la présence de solvants chlorés sur 60 cm à environ 2,50 m de profondeur, corrélant avec les mesures de gaz du sols réalisées auparavant au PID. De plus, la pollution dans les eaux ayant été mesurée lors des précédentes campagnes a permis d'étudier la corrélation entre les mesures au MIP-HPT et le panache estimé de solvant chlorés. L'intérêt du test a été d'utiliser le MIP-HPT pour localiser les zones où les concentrations sont les plus fortes.



Figure 2.14 : A gauche, K est estimé à partir du HPT. Les valeurs estimées sont comparées avec les résultats obtenus au slug test représentés par les carrés rouges. A droite, les concentrations en COV mesurées à l'aide du MIP (courbe rouge) sont comparées aux concentrations mesurées dans l'eau (couleur bleu). Extrait de McCall et al. (2014).

# 2.7 Synthèse et axe de recherche à développer

La caractérisation d'un site contaminé et plus précisément des zones sources de contaminants est un enjeu majeur pour le management de celui-ci. Au fur et à mesures des années, les méthodes évoluent et proposent de plus en plus de solutions pour limiter les incertitudes sur ces zones sources. L'un des points principaux, discuté depuis quelques années est la question du flux massique et du débit massique.

La recherche bibliographique a permis de montrer que ces flux sont de plus en plus utilisés et améliorent la vision du site et le schéma conceptuel. Lorsque ces flux sont ciblés, il est plus facile de localiser la source ou le panache émanant la plus forte quantité de polluants. Néanmoins, la difficulté reste dans la résolution des mesures à prendre en compte pour pouvoir cibler précisément ces flux. Les techniques HRSC permettent de répondre à cette difficulté mais demande un investissement économique important. Les autres méthodes existantes, qu'elles soient directes ou indirectes, sont plus ou moins complexes et peuvent aussi répondre à ces objectifs à condition d'avoir une connaissance a priori de l'échelle des hétérogénéités. Dans le cadre de la thèse, l'objectif est de pouvoir appliquer sur site des mesures de flux afin de faciliter la localisation de source.

Ainsi, l'axe de développement est la mesure indirecte à partir de vitesses de Darcy et des concentrations. Les outils existants pour la vitesse de Darcy ont chacun leur contraintes et demandent soit un temps de mesures parfois très long ou un intervalle de mesures non adapté pour les sites pollués. Le premier objectif a donc été de développer un outil innovant avec (i) une mesure de vitesse de Darcy directe dans le puits; (ii) une mesure sans interférence due aux flux verticaux dans le puits; (iii) une mesure des vitesses réelles horizontales traversant le puits; (iv) un temps réduit de mesure et (v) une distribution verticale des vitesses le long de la crépine.

L'idée est de combiner cet outil vitesse à des mesures de concentrations afin d'avoir une distribution des flux de contaminants dans une zone. L'outil vitesse développé durant la thèse est présenté dans le Chapitre 3 suivant et sera ensuite utilisé sur un cas réel dans le Chapitre 5, afin d'améliorer la caractérisation du site.

Chapitre 3

Développement du *Direct Velocity Tool* (DVT) : un outil innovant pour la mesure des *vitesses de Darcy* et la mesure indirecte de flux massique Une solution innovante pour la mesure des *vitesses de Darcy* directe dans un puits a été développée dans le cadre de la thèse, outil appelé le *Direct Velocity Tool* (DVT). Le DVT fait aujourd'hui l'objet d'un article scientifique publié au *Journal of Hydrology* (Essouayed et al., 2018). Le DVT permet de mesurer des *vitesses de Darcy* allant du centimètre au mètre par jour et ne prend que quelques minutes par mesure (environ 5 à 15 min). Les résultats sont obtenus par un calcul de mélange. La méthodologie, les limites théoriques et les différentes mesures réalisées à l'aide du DVT sont présentées dans ce chapitre.

# 3.1 Fonctionnement du DVT

Le principe du DVT est basé sur la mesure d'un flux de mélange homogène entre l'injection d'un traceur et l'écoulement naturel de l'aquifère. Le DVT est construit à partir d'un tube en PVC, réduit au tiers de sa circonférence, fixé à des vérins facilitant le placage du DVT contre la paroi crépinée du piézomètre. Ceci permet d'isoler une portion du puits en créant une fenêtre réservoir pour la mesure de *vitesses de Darcy*(Figure 3.1). Plus précisément, la fenêtre réservoir est la zone remplie d'eau, délimitée par une couche de néoprène qui la rend étanche sur les côtés (zone grise sur la Figure 3.2). Seule cette partie est plaquée contre la crépine. La fenêtre réservoir permet (i) d'isoler un horizon pour une mesure à une profondeur donnée, (ii) de forcer l'écoulement des eaux souterraines vers le système de mesure visible sur la Figure 3.2.

# 3.1.1 Principe du mélange

Comme présenté sur la Figure 3.2, l'eau provenant de l'aquifère traverse la paroi crépinée du piézomètre pour ensuite remplir la fenêtre réservoir avant de sortir par le point A. Ensuite, l'eau traverse le système de mesure composé d'un tube mélangeur avant de sortir du DVT au point B. A 2 cm de l'entrée du système de mesure, un point d'injection est installé afin d'y injecter le traceur (point C de la Figure 3.2) qui est ensuite mélangé à l'eau souterraine dans le mélangeur. La mesure se fait en sortie du système au niveau du point B. Le système a été construit de façon à ce que le mélange soit homogène dans la gamme de *vitesses de Darcy* considérées. A partir de la loi de conservation de la masse, le débit provenant de l'aquifère peut être calculé en considérant l'équation suivante:

$$Q_{aquifere} C_{aquifere} + Q_{traceur} C_{traceur} = (Q_{aquifere} + Q_{traceur}) C_{melange}$$
 (3.1)

Où Q est le débit  $[L^3 T^{-1}]$ , C la concentration ou la conductivité électrique du mélange  $[M \ L^{-3}]$ .  $Q_{aquifere}$  peut être calculé en mesurant  $C_{aquifere}$  avant le test,  $C_{traceur}$  et  $Q_{traceur}$  sont connus et  $C_{melange}$  est mesurée durant le test.  $Q_{traceur}$  est très faible (entre 2 et 4 mL.min<sup>-1</sup> pour éviter que l'injection du traceur ne contrebalance le débit naturel  $Q_{aquifere}$ . Le débit du traceur et sa concentration (solution saline) sont adaptés en fonction de la conductivité électrique et des vitesses de Darcy potentielles des eaux du site d'étude.



**Figure 3.1 :** (a) Photographie du DVT dans un tube transparent. La partie en néoprène est plaquée contre le tube pour créer la fenêtre réservoir. (b) Vue schématique du dessus lors du placage du DVT.



Figure 3.2 : Schéma du DVT placé dans un piézomètre.

## 3.1.2 Configuration du DVT

Le DVT est composé d'un tiers de tube PVC (63 mm de diamètre intérieur) avec deux parties séparées, (i) une partie convexe composée de néoprène pour créer la fenêtre réservoir dont la face est plaquée contre la paroi crépinée, (ii) une partie concave où est placé le système de mesure avec un mélangeur passif et une sonde de mesure de conductivité. La fenêtre réservoir a une longueur de 30 cm, une largeur d'environ 3.5 cm et une profondeur de 2 mm.

La sortie de la fenêtre réservoir est connectée de manière étanche au système de mesure. Le système de mesure a été créé de façon à produire un mélange homogène entre la solution saline et les eaux naturelles du milieu. La concentration du mélange est ensuite mesurée en sortie avec la sonde. La solution saline est injectée de manière continue depuis la surface à l'aide d'une pompe péristaltique et d'un tube fin de 4 mm de diamètre. L'injection est maintenue jusqu'à atteindre une valeur stable de concentration de mélange (traceur + eau naturelle), permettant de calculer le débit naturel traversant le DVT. Le débit traversant le DVT est défini par l'Equation 3.2. En rapportant à la surface  $S_{Fenetre\ reservoir\ } [L^2]$  au  $Q_{DVT}$   $[L^3\ T]$ , la vitesse de Darcy  $q_{DVT}$   $[L\ T^{-1}]$  est calculé.

$$Q_{DVT} = Q_{traceur} \frac{C_{melange} - C_{traceur}}{C_{aquifere} - C_{melange}} = q_{DVT} S_{Fenetre\ reservoir}$$
(3.2)

#### 3.1.3 Limite de mesure du DVT et nombre de Péclet

Le nombre de Péclet représente le rapport advectif/diffusif. Si le nombre de Péclet est supérieur à 1, alors l'advection sera supérieure à la diffusion. A l'inverse si le nombre de Péclet est inférieur à 1, c'est la diffusion qui est majoritaire. Dans l'intérêt des mesures au DVT, il est important de connaitre la limite à partir du nombre de Péclet, c'est à dire lorsque celui-ci sera inférieur ou égal à 1.

Le nombre de Péclet Pe, dépend de la vitesse d'advection  $v \ [L \ T^{-1}]$ , de la longueur caractéristique  $Lc \ [L]$  et du coefficient de diffusion  $D \ [L^2 \ T^{-1}]$  avec :

$$Pe = \frac{v \times Lc}{D} \tag{3.3}$$

Si l'on considère que dans notre cas nous avons une longueur caractéristique de 2 cm, un coefficient de diffusion égal à  $10^{-5}cm^2.s^{-1}$ , pour un Pe=1, la limite de la vitesse d'advection est de  $5.10^{-6}cm.s^{-1}$  soit  $0.4cm.jour^{-1}$ . Souhaitant mesurer des vitesses de Darcy allant de 1 à 50 cm.jour<sup>-1</sup>, le nombre de Péclet sera donc toujours supérieur à 1, ce qui permet de confirmer que dans notre situation, aucun effet diffusif prendra le dessus sur l'advection.

# 3.2 Modélisation du DVT dans un puits

Afin de connaitre les limites du DVT, il est nécessaire de définir la convergence des écoulements autour du puits dans lequel est installé le DVT. Pour cela, un modèle

en éléments finis a été généré à l'aide de l'interface ORTi3D (www.orti3d.org) et résolu avec Modflow USG (Panday et al., 2013).

## 3.2.1 Concept de convergence des écoulements

Pour un élément circulaire homogène et perméable situé dans un aquifère, le contraste de conductivité hydraulique entre les entités entraine une convergence des lignes de courants (Strack et Haitjema, 1981) à l'amont et une divergence à l'aval du puits. La vitesse mesurée dans un puits sera donc plus élevée que la vitesse de Darcy naturelle dans l'aquifère. Cette relation entre la vitesse de Darcy réelle est définie par un coefficient que l'on nommera  $\beta$  (Drost et al., 1968). Ce facteur, égal au rapport entre d et d' sur la Figure 3.3, permet de définir la vitesse de Darcy dans l'aquifère à partir de la vitesse de Darcy mesurée dans le puits. Pour exemple, le PFM a une conductivité hydraulique élevée  $K_{PFM}$ , qui placé dans un puits conduit à un contraste avec  $K_{aquifer}$ . Ceci crée une convergence des lignes de courant. La relation entre la vitesse de Darcy mesurée par le PFM,  $q_{PFM}$  et la vitesse de Darcy réelle et l'aquifère  $q_{aquifere}$  peut être définie par la relation suivante (Annable et al., 2005) :



(3.4)

**Figure 3.3 :** Convergence des lignes de courant autour d'un puits conduisant au coefficient  $\beta = \frac{d}{d'}$ .

La section suivante détaille les effets du DVT dans le puits, permettant de calculer le coefficient induit par le DVT. En raison de la géométrie complexe du dispositif, le coefficient a été simulé à partir de modélisations.

#### 3.2.2 Paramétrisation

La vue de dessus est schématisée en Annexe A, représentant une boîte de dimension  $100 \times 50$  cm et 15 cm d'épaisseur (la moitié de la longueur de la fenêtre réservoir). Un débit est injecté et pompé en amont et aval du modèle au niveau des zones de fortes conductivités hydrauliques de type sable grossier  $(10^{-3} \text{ m.s}^{-1})$ . Le reste du modèle est composé de sable fin avec une conductivité hydraulique de  $10^{-4}$  m.s<sup>-1</sup>. Un puits de 75 mm de diamètre a été ajouté au centre du modèle, présenté en détail sur la vue approchée de la discrétisation du modèle dans l'Annexe A. La conductivité hydraulique dans le puits est fixée à une valeur très élevée (10 m.s<sup>-1</sup>). La partie étanche du DVT est représentée par des bords à flux nul. La partie permettant de mesurer la vitesse de Darcy est séparée en deux zones, (i) la fenêtre réservoir avec une épaisseur de 2 mm (gris clair sur l'Annexe A) et (ii) le système de mélange composé du tube et d'un filtre (bleu foncé et vert sur l'Annexe A). Ce système de mélange entraine des pertes de charges non négligeables. Celles-ci sont simulées sur le modèle par un tube poreux équivalent à une perte de charge ( $\Delta H_w$ ).

$$\Delta H_w = \frac{Q\Delta x}{A_w K_w} \tag{3.5}$$

Où Q est le débit passant à travers le DVT et donc le système de mélange,  $A_w$ l'aire du tube perpendiculaire à l'écoulement  $[L^2]$ ,  $K_w$  la conductivité hydraulique équivalente du tube  $[L T^{-1}]$  et  $\Delta x$  la longueur du tube du mélangeur [L]. Le  $K_w$ du tube a été ajusté afin d'obtenir une perte de charge du modèle égale à la perte de charge du mélangeur réel soumis à des débits variables où le  $\Delta H_e$  (cm) a été mesuré lors de tests DVT en laboratoire :

$$\Delta H_e = 1.6 \ 10^{-3} \ Q^2 \tag{3.6}$$

Avec Q en cm<sup>3</sup>.min<sup>-1</sup> et la constante 1.6 10<sup>-3</sup> en min<sup>2</sup>.cm<sup>-5</sup>. Une fois la paramétrisation réalisée, en utilisant le modèle, le traçage des particules d'eau est calculé afin de positionner les particules qui entreront ou n'entreront pas à travers la fenêtre réservoir. Ensuite, comme présenté sur la Figure 3.3, il est facile de mesurer le coefficient  $\beta$ , qui est le rapport de d sur d'.

#### **3.2.3** Mesure du coefficient $\beta$ : comparaison sur trois cas

Le premier objectif du modèle a été de comparer le coefficient  $\beta$  sur trois cas différents avec (i) la présence d'un puits seul, (ii) la présence d'un PFM dans un puits et (iii) la présence du DVT dans un puits. Pour les trois cas, la conductivité hydraulique de l'aquifère est la même ( $K = 10^{-4}$  m.s<sup>-1</sup>) avec une vitesse de Darcy q = 11 cm.jour<sup>-1</sup>. Les résultats sont exposés sur la Figure 3.4. Les simulations montrent que dans un même contexte, le DVT entraine un coefficient  $\beta$  supérieur aux coefficients mesurés pour un puits seul ou un PFM présent dans le puits. A noter que pour calculer le coefficient du DVT, seules les particules entrant dans la fenêtre ont été prises en compte. En effet, la vitesse de Darcy mesurée par le DVT concerne l'eau traversant la fenêtre.

# 3. DÉVELOPPEMENT DU DIRECT VELOCITY $TOOL\ (DVT)$ : UN OUTIL INNOVANT POUR LA MESURE DES VITESSES DE DARCY ET LA MESURE INDIRECTE DE FLUX MASSIQUE



Figure 3.4 : Comparaison des coefficients  $\beta$  modélisés sur trois cas.

# **3.2.4** Mesure du coefficient $\beta$ : limites théoriques du DVT

Différents tests du DVT avec différents débits et différents milieux ont été modélisés afin de connaitre les limites de l'outil. La Figure 3.5 montre la distribution du coefficient  $\beta$  en fonction de la conductivité hydraulique de l'aquifère et de la *vitesse de Darcy* de l'aquifère. Une fois les simulations réalisées, une courbe empirique a été développée afin de calculer directement le coefficient  $\beta$  induit par l'outil selon :

$$\beta = 0.7 \ exp^{-2300K} - 200K + 1.2 \tag{3.7}$$

D'après la Figure 3.5, pour un aquifère avec un K supérieur à 0.001 m.s<sup>-1</sup>,  $\beta$  diminue rapidement et donne des valeurs inférieures à 1.



**Figure 3.5 :** Coefficient  $\beta$  du DVT en fonction de K aquifère pour des *vitesses de Darcy* d'un aquifère comprises entre 5 et 40 cm/jour.

# 3.3 Mesures à l'échelle du laboratoire

#### 3.3.1 Contexte

Le DVT a tout d'abord été testé en laboratoire dans une boite à sable A de 68 cm de longueur, 12 cm de largeur et 50 cm de hauteur (Figure 3.6). Un piézomètre crépiné de 80 mm de diamètre a été ajouté au centre de la boite à sable. En amont et en aval du pilote, deux zones de massifs filtrants ont été ajoutées afin d'avoir des conditions limites constantes. La majeure partie du pilote est composée de sable grossier. Deux zones étanches en argile ont été ajoutées entre les bords du pilote et le puits pour éviter les effets de convergence des écoulements et avoir un débit identique entre le milieu poreux et le puits. A l'aide d'une pompe péristaltique, plusieurs débits ont été testés afin de comparer la *vitesse de Darcy* mesurée par le DVT et la *vitesse de Darcy* réelle imposée dans le milieu.

Dans le cadre du projet et en collaboration avec le Laboratoire PERL de Total (Lacq), d'autres essais ont été réalisés dans une deuxième boite à sable B de 100



Figure 3.6 : Caractéristiques de la sandbox utilisée pour la calibration du DVT.

cm de longueur, 50 cm de largeur et 50 cm de hauteur composé de sable grossier avec K = 4.  $10^{-4}$  m.s<sup>-1</sup> (donnant un coefficient  $\beta = 1.60$ ). Seulement deux *vitesses de Darcy* ont été testées (16 et 26 cm.jour<sup>-1</sup>) pour comparer les mesures au Point Velocity Probe et DVT.

#### 3.3.2 Résultats

Plusieurs débits ont été imposés dans la boite à sable A afin d'avoir une large gamme de vitesses de Darcy. Au total, 6 débits ont été imposés donnant des vitesses de Darcy allant de 5 à 30 cm.jour<sup>-1</sup> (Figure 3.7). Comme le montre la figure 3.7, les mesures du DVT sont reproductibles et proportionnelles à la vitesse de Darcy imposée. Néanmoins, à partir d'une vitesse de Darcy imposée de 25 cm.jour<sup>-1</sup>, l'erreur de mesure au DVT augmente mais donne une valeur moyenne corrélée.

Dans la deuxième boite à sable, pour les deux vitesses de Darcy imposées (16 et 26 cm.jour<sup>-1</sup>), le PVP donne respectivement les valeurs de  $23 \pm 2.3$  et  $30 \pm 3$  cm.jour<sup>-1</sup>. Le DVT donne des valeurs de  $25.6 \pm 1$  cm.jour<sup>-1</sup> et  $31 \pm 6$  cm.jour<sup>-1</sup>. Les deux outils donnent approximativement des valeurs proches des vitesse de Darcy imposées dans la boite à sable B.



**Figure 3.7 :** Résultats des *vitesses de Darcy* mesurées au DVT dans la boite à sable A.

# 3.4 Mesures sur le site A

#### 3.4.1 Contexte

Pour valider les essais en laboratoire, le DVT a été déployé en milieu naturel contrôlé, dans un aquifère libre pour être comparé à d'autres techniques. Cet aquifère est localisé sur Bordeaux (FRANCE) dans une formation Plio-Quaternaire. Cette formation est composée de sables fins à moyens. Le mur de la nappe est délimité par une couche d'argile à 6 m de profondeur par rapport au sol. Le niveau piézométrique a été mesuré à 2.80 m de la surface.

Le test a été configuré comme le présente la Figure 3.8. P1, P2, P4 et P5 sont crépinés de 5 à 6 m par rapport au sol ayant comme limite la couche d'argile. Un pompage sur P5 et une injection sur P1 sont imposés pour contrôler le débit. Le débit pompé/injecté est de 75 L.h<sup>-1</sup>, imposé de manière continue durant une période de trois semaines de tests (permettant de réaliser l'intégralité des tests avec Essai de traçage, *Point dilution test*, PFM et DVT). Les mesures de *vitesse de Darcy* ont été réalisées sur le piézomètre P3 qui est crépiné de 5 à 5,60 m de

profondeur.

#### Essai de traçage

Pour l'essai de traçage, une solution de NaCl à 1 g.L<sup>-1</sup> a été utilisée. Deux volumes différents ont été injectés durant deux durées différentes (5 et 2.5 min). La solution saline a été injectée au fond du piézomètre P2 à un débit de 8 L.min<sup>-1</sup>. Une boucle de circulation a été mise en place de manière continue sur P3 afin d'homogénéiser la concentration dans le piézomètre et de mesurer continuellement la conductivité électrique de l'eau (utilisation d'un appareil Consort Multiparameter C3010).

### PFM

Le PFM, principalement utilisé pour la mesure des flux, a été mis en place sur le site A seulement pour la mesure des *vitesses de Darcy*. Pour rappel, le PFM est initialement chargé en traceurs dont le ratio de disparition après exposition dans le puits permet de calculer la *vitesse de Darcy*. Le PFM doit être exposé durant 1 à 4 semaines en fonction des vitesses du milieu. Après exposition, les charbons du PFM sont récupérés afin d'être analysés.

Pour ce test, un PFM d'une longueur de 15 cm et de 68 mm de diamètre a été construit dans notre laboratoire à partir des informations disponibles sur l'article Hatfield et al. (2004). Quatre alcools ont été utilisés en tant que traceurs (Methanol, Ethanol, Propan-2-ol et le n-Hexanol). Pour produire un PFM de 15 cm, plus de 200 g de charbons actifs ont été préparés à l'avance. Un échantillon initial de charbon non exposé sur site est conservé afin de le comparer aux charbons exposés. Le PFM a été installé dans le piézomètre P3 à une profondeur de 5.40 m durant 6 jours. Les charbons actifs ont ensuite été récupérés et homogénéisés. Les charbons actifs (initiaux et exposés) sont ensuite analysés à l'aide d'un GCMS avec une colonne de type 5 SIL-MS. Seul le propan-2-ol a été pris en compte. Le ratio de traceur étant supérieur à 0.3 (mg.L<sup>-1</sup> après exposition/mg.L<sup>-1</sup> avant exposition), il a été possible d'utiliser l'équation suivante pour le calcul de la *vitesse de Darcy* réelle  $q_{aquifere}$  (Annable et al., 2005) :

$$q_{aquifere} = \left[1.67 \ r\theta R_d \ (1 - M_r)\right] / \ \beta t \tag{3.8}$$

Où r est le rayon du PFM [L],  $\theta$  la teneur en eau du PFM [-],  $R_d$  le facteur de retard du traceur utilisé pour le calcul (propan-2-ol dans notre cas) [-],  $M_r$  la masse relative de traceur restant après exposition [M],  $\beta$  le coefficient de convergence [-] et t le temps d'exposition du PFM [T].

#### Point dilution test

Le *Point Dilution Test* est basé sur une analyse linéaire du logarithme de la dilution du traceur injecté dans le puits. Le coefficient de la relation entre le log



**Figure 3.8 :** Photographie et caractéristiques des piézomètres utilisés pour le test en milieu contrôlé.

de C et le temps est proportionnelle à la *vitesse de Darcy* apparente de l'eau dans le puits. Cette méthode requiert (i) un régime permanent, (ii) un mélange homogène entre le traceur et l'eau du puits et (iii) un effet densitaire négligeable pour éviter les erreurs de mesures (Piccinini et al., 2016).

Dans le puits, selon Freeze et Cherry (1979), la concentration en traceur diminue de la façon suivante :

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{Aq_aC}{W} \tag{3.9}$$

Avec A la section perpendiculaire à l'écoulement naturel  $[L^2]$ ,  $q_a$  la vitesse de Darcy apparente  $[L T^{-1}]$  et W le volume de dilution  $[L^3]$ . La vitesse de Darcy réelle est ensuite calculée en prenant en compte le coefficient  $\beta$  adapté. Dans notre cas, nous avons considéré que la valeur de  $\beta$  pour le Dilution test serait proche de 2 (Drost et al., 1968) selon la configuration de l'essai.

En général, le *Point dilution test* est réalisé en isolant une portion du puits afin d'éviter les effets densitaires. Dans notre cas, le piézomètre utilisé (P3), est crépiné sur 60 cm avec un diamètre de 68 mm ce qui est satisfaisant pour le test. Une solution saline NaCl à 1 g.L<sup>-1</sup> a été utilisée en tant que traceur. Un volume total de 500 mL a été injecté (durant 350 minutes) dans le but d'augmenter la salinité de l'eau du forage de 1.5 à 3 fois plus. La solution a été injectée à un débit très faible (1.4 mL.min<sup>-1</sup>). Afin d'avoir une mesure régulière du point P3, une recirculation a été imposée sur le piézomètre à un débit de 1 L.min<sup>-1</sup> correspondant à 1 volume de puits analysé par minute (Lamontagne et al., 2002). La conductivité a été enregistrée à l'aide du Consort Multiparameter C3010.

## 3.4.2 Résultats

#### Essai de traçage

Les résultats des essais de traçage sont présentés sur la Figure 3.9. Pour les deux tests, les pics observés arrivent 19 heures après injection. La distance entre le point P2 et P3 est de 38.5 cm. Le logiciel TRAC a été utilisé pour estimer la porosité et la *vitesse de Darcy* du milieu (Gutierrez et al., 2013). Les résultats sont représentés sur le Tableau 3.1. La présence de sable grossier dans le milieu testé, laisse supposer que la porosité est d'environ 20% (estimée en utilisant le logiciel TRAC). La valeur moyenne de la *vitesse de Darcy* est estimée à 14.50 ± 1.8 cm.jour<sup>-1</sup> (Figure 3.11).

#### $\mathbf{PFM}$

Les PFM utilisés sur ce site ont une conductivité hydraulique de 3.5  $10^{-3}$  m.s<sup>-1</sup> (Hatfield et al., 2004). Le milieu naturel ayant une valeur de K égale à 6.3  $10^{-4}$  m.s<sup>-1</sup>, un coefficient  $\beta = 1.69$  est pris en compte pour ces PFMs (en utilisant l'Equation 3.4). La moyenne des vitesses mesurées est de  $10.25 \pm 2.5$  cm.jour<sup>-1</sup>.



**Figure 3.9 :** Résultats des essais de traçage 1 et 2 montrant un pic de concentration 19 heures après l'injection. Les lignes pleines représentent les valeurs modélisées sur TRAC.

Tableau 3.1 : Résultats des essais de traçage
---

	Vitesse de pore $V_p$ (cm.jour <sup>-1</sup> )	Porosité w	Vitesse Darcy (cm.jour <sup>-1</sup> )	$\mathbf{de}_{q}$
Essai de traçage 1 - 40 L	63	0.21	13.24	
Essai de traçage 2 - 20 L	60	0.26	15.72	

En considérant les valeurs exposées dans le Tableau 3.2, l'écart-type de reproductibilité est de 0.97 m.s<sup>-1</sup>. Néanmoins, Annable et al. (2005) ont considéré une erreur absolue de mesure 25% sur chaque mesure de PFM, erreur que nous allons prendre en compte (erreur à  $\pm$  2.50 m.s<sup>-1</sup>, cf. Figure 3.11).

			<i>M<sub>r</sub></i> (-)	Vitesse de Darcy réelle $q$ (cm.jour <sup>-1</sup> )
t (jours)	6	Sample 1	0.62	12.76
$\theta$ (-)	0.55	Sample 2	0.68	10.74
$r \ (\mathrm{cm})$	3.4	Sample 3	0.79	7.05
$R_d$ (-)	109	Sample 4	0.69	10.41
			Moyenne	10.25
			Ecart-type	$\pm 2.5$

#### Tableau 3.2 : Résultats des mesures au PFM.

#### Point dilution test

Pour le Point dilution test, la mesure est considérée comme terminée lorsque la concentration atteint 25% de plus que sa valeur initiale (Lamontagne et al., 2002). Cette valeur est représentée par le palier obtenu au bout de 60 minutes sur la Figure 3.10. Avant le palier, une pente est mesurée pour le calcul de la vitesse de Darcy. Le coefficient directeur de la pente est de 0.04 min<sup>-1</sup> qui est égal à la valeur  $\frac{2v_a}{\pi r}$ . La vitesse de Darcy apparente  $v_a$  calculée est de 290 cm.jour<sup>-1</sup> (r = 3.2 cm). En prenant en compte un coefficient  $\beta$  de 2, la vitesse estimée sur P3 à l'aide du Point dilution test est de 145 cm.jour<sup>-1</sup>.

Brouyère et al. (2008) ont défini  $Q_{in}$  et  $Q_{cr}$  pour connaitre le débit d'injection critique du traceur avec  $Q_{in}$  le débit d'injection du traceur et  $Q_{cr}$  le débit à ne pas dépasser. Si  $Q_{in} > Q_{cr}$ , alors l'essai de dilution est impossible du fait du régime turbulent empêchant ainsi la mesure (Jamin et al., 2015).

$$Q_{cr} = \pi Q_t \tag{3.10}$$

Où  $Q_t$  est le débit en relation avec la *vitesse de Darcy* et la section perpendiculaire à l'écoulement.

Sur le site A, la section à prendre en compte correspond à la longueur de la crépine (60 cm<sup>2</sup>) et du diamètre du puits (6.8 cm). En considérant comme hypothèse que la vitesse de Darcy dans notre milieu contrôlé est de 15 cm.jour<sup>-1</sup>,  $Q_{cr}$  est environ égal à 1 L.h<sup>-1</sup>. Or, pour le test de dilution, 500 mL de solution ont été injectés durant 350 min ( $Q_{in} = 0.08 \text{ L.h}^{-1}$ ), ce qui prouve que le test est valide mais donne cependant une valeur de vitesse de Darcy trop importante qui est inexpliquée.



Figure 3.10 : Log du ratio de traceur en fonction du temps. La pente est calculé entre 0 et 60 minutes.

#### DVT

Avec une conductivité hydraulique de 6.3  $10^{-4}$  m.s<sup>-1</sup>, le coefficient  $\beta$  du DVT est de 1.54 (Figure 3.5). La *vitesse de Darcy* moyenne calculée à partir du DVT est de 17 ± 2.70 cm.jour<sup>-1</sup>, l'écart-type étant obtenu par un test de reproductibilité sur trois essais (Figure 3.11).

L'ensemble des résultats (DVT, PFM et essai de traçage) est illustré sur la Figure 3.11.

# 3.5 Mesures sur le site B

#### 3.5.1 Contexte

Le DVT et le PFM ont été utilisés sur un site contaminé afin de mesurer les vitesses de Darcy. Le site comporte un aquifère Quaternaire semi-confiné de formation alluviale composé (i) d'un sable hétérogène allant du sable fin à très grossier et (ii) de lentilles argileuses. Le niveau piézométrique a été mesuré à 4 m de profondeur par rapport au sol. Une couche argileuse est localisée à 7.50 m de profondeur définissant ainsi le mur de l'aquifère. Un essai de pompage a montré une conductivité hydraulique moyenne de 5  $10^{-5}$  m.s<sup>-1</sup>. Quatre piézomètres (WA1, WA2, WA3 et WA4 sur la Figure 3.12) aux mêmes caractéristiques ont été utilisés pour le test (crépine de 5 à 8 m par rapport à la surface et diamètre de 80 mm).



**Figure 3.11 :** Résultats des mesures de *vitesses de Darcy* avec le DVT, le PFM et l'essai de traçage.



**Figure 3.12 :** Vue de haut des piézomètres sur le site contaminé pour la comparaison DVT et PFM.

## 3.5.2 Résultats

Au total 6 PFMs d'une longueur de 1 m chacun ont été installés afin d'avoir une distribution verticale des *vitesse de Darcy*. Deux PFMs ont été insérés dans chacun des piézomètres WA1 et WA4, et un seul dans chacun des piézomètres WA2 et WA3 (Figure 3.12). Le DVT a été utilisé sur une seule profondeur (6.35 à 6.65 m par rapport au sol) pour tester la reproductibilité. La conductivité hydraulique

K de la zone étant estimé à 5  $10^{-5}$  m.s<sup>-1</sup>, le DVT et le PFM ont respectivement un coefficient  $\beta$  de 2.09 et de 2.

L'intervalle de la distribution verticale des *vitesses de Darcy* mesurées au PFM s'étale de 4 à 13 cm.jour<sup>-1</sup> pour une valeur moyenne maximale de 9 cm.jour<sup>-1</sup> sur WA1 et une moyenne minimale de 5.3 cm.jour<sup>-1</sup> pour WA2. Les mêmes profondeurs ont été prises en compte pour les deux outils afin d'avoir la meilleure comparaison possible. Les valeurs du DVT varient de 4 à  $8 \pm 1$  cm.jour<sup>-1</sup> (écart-type des trois mêmes mesures pour chaque profondeur). En prenant en compte une erreur de 25%, les PFMs donnent des résultats allant de 5 à  $9 \pm 1.8$  cm.jour<sup>-1</sup> (Figure 3.13).



Figure 3.13 : Comparaison des mesures DVT et PFM sur site réel sur WA1, WA2, WA3 et WA4.
## 3.6 Conclusion

Le *Direct Velocity Tool* a été développé dans le cadre de la thèse afin d'apporter une nouvelle solution face aux contraintes retrouvées sur les différents outils existants. Le modèle qui est présenté sur ce chapitre correspond au dernier prototype développé au laboratoire. En effet, durant la conception et le développement, diverses difficultés ont été rencontrées tels que (i) le placage étanche contre la paroi crépinée, (ii) la valeur optimale du débit d'injection du traceur ou (iii) l'amélioration du système de mélange permettant d'avoir un mélange homogène.

Le premier test du DVT "optimal" fait en laboratoire dans la boite à sable A a montré une réponse linéaire entre la *vitesse de Darcy* imposée et la *vitesse de Darcy* mesurée. Les vitesses testées vont de 5 à 30 cm.jour<sup>-1</sup> et un écart-type plus important a été observé pour les *vitesses de Darcy* les plus élevées ( $\pm$  6.46 cm.jour<sup>-1</sup> pour une *vitesse de Darcy* de 30 cm.jour<sup>-1</sup>).

En milieu contrôlé sur le site A, la multicomparaison a permis de tester la fiabilité du DVT par rapport à d'autres outils. Ainsi, le PFM, l'essai de traçage et le DVT donnent respectivement des vitesses de Darcy égales à 10.25, 14.48 et 17.8 cm.jour<sup>-1</sup>. Le DVT et le PFM ont respectivement des erreurs de 2.70 cm.jour<sup>-1</sup> et 2.50 cm.jour<sup>-1</sup> qui restent proches de l'écart-type de l'essai de traçage (1.75 cm.jour<sup>-1</sup>). Le Point dilution test a largement surestimé la valeur de vitesse de Darcy (145 cm.jour<sup>-1</sup>). Lors d'un essai de multicomparaison entre le PVP et d'autres techniques, Labaky et al. (2009) ont aussi montré que le Point dilution test présentait une réponse similaire à notre expérience, avec des valeurs 10 fois supérieures à la normale. Cet écart est probablement dû à un effet densitaire ou à un mélange qui ne s'est pas fait de manière homogène malgré les conditions théoriques respectées.

Sur le site B, le PFM donne des valeurs allant de 5 à 9 cm.jour<sup>-1</sup>. Le DVT donne des valeurs de 4 à 8 cm.jour<sup>-1</sup>. Les incertitudes de mesures sont respectivement de 1 et de 1.8 cm.jour<sup>-1</sup> pour le DVT et le PFM. Les résultats des deux outils montrent ainsi une bonne corrélation sur les mesures de *vitesse de Darcy*.

Le tableau ci-dessous résume les résultats obtenus pour les différents tests, illustrant la pertinence des mesures effectuées avec le DVT.

	Site A					Site B	
	Essai de traçage	BHD	PFM	DVT	PFM	DVT	
q mesurée cm.jour <sup>-1</sup>	14.5	145	10.3	17.8	5 - 9	4 -8	
Écart-type	$\pm 1.8$	Inconnu	$\pm 2.5$	$\pm 2.7$	$\pm 1.8$	$\pm 1$	

Tableau 3.3 : Résultats des mesures de vitesses de Darcy.

## 3.7 Utilisation du DVT dans la mesure du flux

## 3.7.1 Comparaison des *vitesses de Darcy* mesurées au DVT et estimées au Préleveur ciblé (PC)

#### Mesures de K avec le PC

Comme exposé dans le chapitre précédent, durant les travaux de thèse et les différentes campagnes de terrain, le PC développé par INNOVASOL a été utilisé à la fois pour l'échantillonnage et la mesure de la conductivité hydraulique multiniveau.

Pour cela, entre les deux packers, une sonde de pression est installée afin de mesurer le rabattement spécifique de l'horizon prélevé dans le puits. Les conductivités hydrauliques de chaque horizon sont ensuite estimées à partir d'un modèle radial. Le modèle radial a été réalisé sur MODFLOW représentant un piézomètre de 80 mm entouré d'un massif filtrant allant de 80 à 140 mm. Le domaine est considéré comme homogène. Les packers du PC sont définis par des zones de K nulles. La pompe de prélèvement est insérée dans le modèle selon sa position dans l'outil (entre les deux packers). Le modèle a permis de reproduire la relation mesurée entre le débit de pompage Q (mL.min<sup>-1</sup>), mesuré en sortie d'outil et la variation de pression mesurée par la sonde dH (cm) avec :

$$K[m/s] = \left(\frac{0.012}{25 \ dH/Q}\right)^{-1} \tag{3.11}$$

Cette relation n'est valable que pour une configuration de pompage multiniveau en considérant que les deux packers se trouvent dans la partie mouillée du puits (non valable si le pompage se fait au niveau du toit de la nappe ou au fond du piézomètre).

#### Comparaison des vitesses de Darcy entre le DVT et le PC

A partir des mesures de K via le PC, il est possible d'avoir une approximation de la *vitesse de Darcy* en estimant le gradient hydraulique pour la zone où se trouve



**Figure 3.14 :** Comparaisons entre mesures directe de *vitesses de Darcy* au DVT et indirecte au PC.

le piézomètre. La Figure 3.14 affiche les vitesses de Darcy du DVT comparées aux vitesses de Darcy déduites du PC et des gradients hydrauliques respectifs. La Figure 3.14 montre une faible corrélation ( $R^2 = 0.629$ ), mais il est connu que des erreurs peuvent exister dans l'estimation locale des gradients hydrauliques ou de K pouvant expliquer les résultats (Gelhar, 1993). Cependant les vitesses de Darcy sont bien du même ordre de grandeur, donc le DVT fournit bien des vitesses de Darcy compatibles avec l'approche classique des calculs de vitesses de Darcy.

## 3.7.2 Comparaison des flux massiques entre le DVT et le PFM

Durant ces trois années de thèse, plusieurs campagnes sur différents sites ont été réalisées avec des PFMs, le PC et le DVT, ce qui a permis d'analyser la corrélation entre mesures de flux directes et indirectes.

La Figure 3.15 met en avant la corrélation entre les mesures directes de flux massiques et indirectes au DVT+PC. Le coefficient de corrélation  $R^2$  est de 0.874 ce qui montre une bonne corrélation entre mesure directe et indirecte de flux massique.

	Site 1	Site 2
Nombre de puits analysés	3	4
Nombre de PFMs utilisés	2(1)+1+1	2(1)+2(1)+1+1
Essai DVT et PC	sur tous $+$	plusieurs prof.

**Tableau 3.4 :** Inventaire des mesures réalisées sur site à l'aide du PFM, PC et DVT. 2(1) = 2 PFMs dans un 1 piézomètre.



**Figure 3.15 :** Comparaisons des mesures de flux massiques à partir de mesures indirectes (DVT+PC) et de mesures directes au PFM.

## 3.8 Discussion

Le DVT est une solution intéressante pour la mesure des vitesses de Darcy dans un puits, notamment pour une distribution verticale de ces vitesses de Darcy. Ceci est une information importante à prendre en compte pour l'étude d'un site. Les sites testés dans le chapitre donnent un intervalle assez limité de mesures des vitesses de Darcy au DVT (entre 0 et 30 cm.jour<sup>-1</sup>). Néanmoins, des essais ont été réalisés sur un site (autre que celui présenté pour la thèse) avec une forte conductivité hydraulique donnant des vitesses de Darcy allant de 90 à 190 cm.jour<sup>-1</sup>, augmentant l'intervalle potentiel des mesures du DVT (avec un coefficient  $\beta$  inférieur à 1). D'autres mesures seront conduites dans des contextes différents afin d'évaluer les capacités optimales du DVT. Ces nouvelles mesures permettront d'évaluer la fiabilité de l'outil et son applicabilité sous différentes conditions.

La simulation du coefficient  $\beta$  induit par le DVT a permis d'améliorer la compréhension des limites de l'outil. Les résultats ont mis en évidence que si un aquifère présente une valeur de K supérieure à  $2.10^{-3}$  m.s<sup>-1</sup>, les incertitudes de mesures seront plus grandes car une part de plus en plus faible du flux naturel traverse l'outil. Des études complémentaires sont nécessaires pour évaluer les pertes de charges induites par le système de mesure, afin d'adapter le DVT pour une gamme plus large de *vitesses de Darcy*. De plus, l'utilisation d'un autre type de traceur peut être une solution pour éviter de potentiels effets densitaires dans le puits.

L'association du DVT et du PC a aussi été comparée aux résultats mesurés au PFM, démontrant la bonne corrélation des flux massiques entre le DVT+PC et le PFM. La combinaison du DVT et du PC est donc une solution pour la mesure de flux massiques, ce qui apporte une information supplémentaire pour la caractérisation du site pollué et optimise sa bonne gestion.

Dans le cadre des travaux de thèse, la combinaison des deux outils est utilisée pour compléter l'analyse du site réel dans le Chapitre 5 en parallèle de la stratégie de modélisation pour la localisation d'une source. Cette stratégie de modélisation a été tout d'abord développée sur deux cas synthétiques présentés dans le Chapitre 4.

Chapitre 4

Modélisation numérique pour la localisation d'une zone source : application sur cas synthétiques

# 4.1 La modélisation des eaux souterraines et du transport

La modélisation de l'écoulement des eaux souterraines ou du transport permet une meilleure compréhension et une meilleure vision du fonctionnement des aquifères et des contaminants présents dans la nappe. Ceci permet ainsi d'utiliser les résultats obtenus comme un réel outil de gestion, de prévision et d'aide à la décision dans la gestion d'une zone contaminée. Dans notre cas d'étude, le choix de la modélisation a été fait pour l'aide à la localisation de la source de contaminants.

## 4.1.1 Définition d'un modèle

Un modèle est une représentation mathématique simplifiée de processus réels, basée sur les connaissances du système considéré et des équations théoriques. A partir de variables d'entrée représentées par les paramètres, le modèle détermine plusieurs variables de sortie qui sont des données simulées. Ces données simulées peuvent être comparées à des données observées sur le terrain afin d'évaluer la qualité de la simulation. Plus l'écart entre valeurs observées et simulées est faible, plus les paramètres d'entrée seront considérés comme optimaux. Néanmoins, un modèle ne représente jamais parfaitement la réalité et une évaluation du niveau de confiance doit être réalisée. Il est donc important de connaitre les sources d'incertitudes pouvant jouer sur un modèle. Ces sources d'incertitudes sont généralement liées aux hypothèses du modèle avec les conditions imposées aux limites du modèle, aux paramètres d'entrée, aux erreurs de mesures sur les données observées ou à la discrétisation (spatiale et temporelle) (Doherty, 2010).

#### 4.1.2 Modélisation directe et modélisation inverse

La modélisation directe vise à obtenir des données simulées à partir d'une distribution de paramètres d'entrée. Dans le cas des eaux souterraines et du transport, les propriétés du milieu sont représentées par les paramètres d'entrée tels que le champ de conductivité hydraulique K, la zone source de contaminants, la dispersivité  $\alpha$ , une zone de pompage ou des conditions limites en amont et aval du domaine. Ces paramètres permettent de calculer des charges hydrauliques et des concentrations en polluants. La modélisation directe est utilisée pour l'étude des prédictions afin de connaitre l'extension potentielle d'un panache.

Néanmoins, dans les problématiques liées à l'hydrogéologie et au transport, les paramètres d'entrée sont complexes à obtenir du fait des hétérogénéités présentes dans le sous-sol et du peu de points de mesure. C'est là que la modélisation inverse entre en jeu. L'objectif est d'estimer les paramètres d'entrée afin de mieux caractériser les propriétés du milieu. On parle alors de calibration des paramètres basée sur la minimisation de l'écart entre données observées et données simulées.

## 4.1.3 Calibration d'un modèle

Dans les années 2000, plusieurs guides de modélisation expliquent la démarche à adopter pour la construction et l'utilisation de modèles. Verardo (2016) a fait un état des lieux des étapes successives sous forme de protocole généralement retrouvé dans ces guides à l'exemple de la collecte de données d'observations, de la calibration du modèle, de la simulation et de l'interprétation.

La calibration est un des points les plus importants permettant d'ajuster les paramètres d'entrée. En faisant varier ces paramètres, le but est d'obtenir la meilleure adéquation possible entre les données simulées et observées (Middlemis et al., 2001). La calibration peut être réalisée manuellement ou automatiquement. La calibration manuelle est souvent réalisée en première étape pour établir le modèle conceptuel. Néanmoins, un processus de calibration entièrement manuelle demande un temps non négligeable pour atteindre un calage précis. Les calibrations automatiques actuelles utilisent des algorithmes mathématiques d'optimisation facilitant la recherche de l'erreur minimum entre valeurs observées et simulées (PEST/PEST++ ou UCODE). Le processus se fait de manière itérative jusqu'à atteindre un minimum d'une fonction dite "objectif". Cette fonction objectif représente l'erreur entre données observées et données simulées. De plus, l'avantage des procédures automatiques est de vérifier la sensibilité des paramètres entre elles et envers les observations.

## 4.1.4 La fonction objectif

La fonction objectif correspond à l'écart entre données simulées et données observées. Celle-ci permet de mesurer la performance de la calibration. Différents outils statistiques existent pour mesurer la fonction objectif avec :

- la mesure des résidus : écart entre les données observées et données simulées;
- la mesure de l'erreur entre données observées et données simulées (Racine carré de l'erreur quadratique moyenne : RMSE, ou racine carré de l'erreur quadratique moyenne normalisée : NRMSE);
- la mesure de l'écart-type;
- la mesure du coefficient de corrélation entre valeurs observées et simulées.

Comme cité précédemment, ce sont les méthodes d'optimisation qui sont utilisées pour minimiser la fonction objectif. Dans le cadre des problématiques liées aux eaux souterraines et au transport, ce sont généralement des méthodes d'optimisation non linéaire qui permettent de minimiser la fonction objectif de manière itérative, jusqu'à ce que celle-ci soit minimale.

## 4.2 État de l'art sur la localisation d'une source

L'identification de la zone source de polluants constitue un défi pour la gestion d'un site contaminé. Une bonne connaissance de la zone source permet une meilleure stratégie pour la dépollution du site et entraine ainsi une réduction des coûts de traitement. Comme nous l'avons signalé en Chapitre 1 et 2, la localisation des flux massiques les plus importants permet de mieux caractériser un panache et de localiser plus facilement la source. Néanmoins, les propriétés du milieu poreux sont très hétérogènes, entrainant aussi des flux très hétérogènes.

Au cours des 30 dernières années, les modèles d'eaux souterraines et de transport couplés à différentes méthodes inverses ont été développés pour la localisation d'une source. Un certain nombre de méthodes sont disponibles dans la littérature pour l'identification d'une source sur des cas synthétiques, principalement à partir de données observées de concentrations. Ces méthodes, présentées dans la section ci-dessous, peuvent être classées en trois groupes avec (i) les approches d'optimisation non linéaire, (ii) les approches géostatistiques et (iii) les approches de *Backward simulation*, à partir de solutions analytiques inversées (Bagtzoglou et Atmadja, 2005).

## 4.2.1 Revue bibliographique sur la localisation de la zone source

#### Méthodes d'optimisation

Les méthodes d'optimisation sont les approches les plus utilisées pour localiser la source. Gorelick et al. (1983) ont été parmi les premiers à utiliser une méthode d'optimisation pour la localisation de source en comparant un programme de type linéaire avec une régression multiple. L'essai a été effectué sur un cas synthétique 2D homogène, en régime permanent puis transitoire. Tous les paramètres du milieu étaient connus (hydrogéologie et transport). Les auteurs n'ont pas considéré d'incertitudes sur les paramètres mais des erreurs sur les observations ont été ajoutées. Les données observées étaient représentées par l'historique des contaminants. Néanmoins, leur méthode très restrictive ne convient pas aux cas réels dus aux paramètres considérés comme tous connus. Wagner (1992) a utilisé une méthode d'optimisation non linéaire et a travaillé sur un cas synthétique 2D en régime permanent. Il a développé une approche pour répondre simultanément à l'estimation des paramètres et à la caractérisation de la source à partir d'une estimation non linéaire de vraisemblance maximum (Nonlinear Maximum Likelihood Estimation). Les paramètres d'entrée ne sont pas connus (conditions limites, conductivité hydraulique K, dispersivité  $\alpha$  et porosité w). La source a été considérée comme émettant en continu et la distribution de K est composée de deux grandes zones homogènes, ce qui facilite la localisation de la source. Mahar et Datta (1997) ont utilisé une méthode d'optimisation non linéaire combinant l'identification de la source et l'emplacement de nouveaux points de mesures. Ils ont travaillé sur un cas synthétique 2D homogène en régime permanent avec des paramètres connus. Les mêmes auteurs ont travaillé sur le même cas synthétique 2D homogène pour identifier une source transitoire avec plusieurs observations (Mahar et Datta, 2000). Datta et al. (2009) se sont servis de ce cas pour estimer simultanément les paramètres  $(K, \alpha \text{ et } w)$  et la chronique de plusieurs sources potentielles. Les paramètres estimés étaient proches de la valeur réelle ce qui démontre l'efficacité de la méthode dans un cas homogène. Sun et al. (2006) ont également étudié plusieurs cas synthétiques homogènes en 2D en régime transitoire avec une approche non linéaire permettant de réduire le temps de calcul. Aral et al. (2001) ont utilisé un algorithme génétique basé sur une optimisation non linéaire augmentant l'efficacité du processus. Cette approche utilisait un modèle hétérogène 2D en régime permanent avec des paramètres connus et une source transitoire. D'autres méthodes de type hybrides utilisant des algorithmes génétiques ont également été développées par Singh et al. (2004). Yeh et al. (2007), Yeh et al. (2014), Ayvaz (2016), Xu et Gómez-Hernández (2016) et Xu et Gómez-Hernández (2018).

Bashi-Azghadi et al. (2016) ont travaillé sur un cas réel avec un modèle d'optimisation non linéaire qui minimise le nombre d'observations nécessaires pour la localisation de la source. Les paramètres hydrogéologiques et de transport sont inconnus  $(K, \alpha)$ . L'historique des contaminants a été utilisé. Le site est une raffinerie fortement polluée en raison de fuites de plusieurs réservoirs de pétrole préalablement localisés. Pour minimiser le nombre de puits, les auteurs ont utilisé une analyse de Monte Carlo pour examiner les incertitudes à partir d'un grand nombre de scénarios générés aléatoirement, ou choisis parmi plusieurs suppositions (présence de 8 réservoirs et fuite dans l'un de ces réservoirs). L'approche a permis de localiser la source en limitant le nombre de mesures de contaminants dans le temps.

#### Méthodes géostatistiques

Ces 20 dernières années, des approches géostatistiques ont été développées pour l'identification des sources. Snodgrass et Kitanidis (1997) ont utilisé une méthode géostatistique combinée à une approche Bayesienne pour localiser une source dans une zone identifiée dans un cas synthétique 1D homogène et une source transitoire. Les paramètres d'entrée sont connus. Michalak et Kitanidis (2004a) se sont servis d'une modélisation inverse géostatistique pour l'identification de source de contaminants sur un site réel avec des données historiques de concentrations. Les paramètres sont aussi connus. L'étude a montré que l'historique de la contamination peut être estimé avec une bonne précision. Gzyl et al. (2014) ont travaillé sur un cas réel avec plusieurs sources en utilisant une stratégie à plusieurs étapes avec (i) des mesures IPT (*Integral Pump Test*) pour quantifier les flux massiques de contaminants, (ii) l'identification de la source grâce au pompage et (iii) l'historique du rejet des contaminants par méthode géostatistique. Butera et al. (2013) ont développé une approche analytique pour la localisation de source basée sur l'approche géostatistique développée par Snodgrass et Kitanidis (1997).

#### Méthodes de transport inversé

D'autres méthodes pour la localisation de la source ont été développées utilisant le Backward simulation couplé à de la géostatistique. Cette simulation inverse équivaut à inverser le modèle de transport afin de connaitre son point d'origine. Bagtzoglou et al. (1992) ont été parmi les premiers à utiliser l'équation du transport inversé (méthode adjointe) pour localiser la source en considérant les paramètres de l'écoulement comme connus. Neupauer et Wilson (1999) ont utilisé la méthode adjointe sur un cas synthétique 1D avec seulement une seule observation en régime transitoire. L'approche a aussi été testée avec plusieurs observations pour localiser la source toujours sur un cas 1D (Neupauer et Wilson, 2005). Michalak et Kitanidis (2004b) ont couplé la méthode adjointe et une approche géostatistique pour identifier l'historique des contaminants. Cupola et al. (2015) ont comparé la méthode adjointe avec l'approche développée par Butera et al. (2013) pour la localisation d'une source dans un bac à sable. Les auteurs ont prouvé la fiabilité des deux méthodes tout en démontrant que la méthode adjointe est adaptée pour la localisation d'une seule source contrairement à l'approche développée par Cupola et al. (2015). La méthode adjointe est toujours basée sur des champs de K connus.

Plus récemment, Xu et Gómez-Hernández (2018) ont présenté une étude sur l'identification simultanée de la variabilité du champ de K et de la localisation de la source à partir de l'approche du filtre de Kalman sur trois cas synthétiques en régime transitoire. Aucune information sur les conductivités hydrauliques n'était disponible à part leur distribution marginale. Les autres paramètres ( $\alpha$  et w) sont considérés comme connus. La source a été correctement retrouvée et le champ de K caractérisé de manière raisonnable. Cette étude est très intéressante du fait que le champ de conductivité hydraulique soit estimé en parallèle de la localisation de la source. Cette étude se rapproche d'une problématique réelle avec les incertitudes retrouvées sur un site contaminé. Néanmoins, ils ont considéré les paramètres de transport comme étant connus et travaillant en régime transitoire.

## 4.2.2 Récapitulatif et avis sur l'existant

Le Tableau 4.1 présente les études existantes que nous avons pu identifier pour la localisation d'une source et montre que peu d'études sont applicables à une problématique réelle. En effet, le challenge sur l'étude des cas réels repose sur les incertitudes liées à l'hétérogénéité du milieu et des propriétés hydrogéologiques et de transport inconnues, ou très mal connues, rendant difficile la localisation de la source. Plusieurs études considèrent des paramètres connus et/ou homogènes. En effet, la localisation de la source est très sensible aux incertitudes des paramètres. De plus, si la source est considérée comme émettant de manière continue, le problème devient beaucoup plus complexe. Nous pouvons observer sur le tableau 4.1 que les thématiques les plus courantes, utilisent des paramètres K et  $\alpha$  connus et une source émettant de manière transitoire. Voulant se rapprocher d'une problématique de site réel, nous souhaitons nous placer sur la thématique prenant en compte des paramètres inconnus et une source continue (avec K: Ht/I [Hétérogène, Inconnu],  $\alpha$ : I [Inconnu] et source: Cont. [Continue] car non présent sur le tableau).

De plus, les méthodes mises en place pour la localisation de la source, nécessitent un grand nombre de simulations de modèle et demandent souvent une charge de calcul importante notamment pour le transport advectif et dispersif. Ainsi, pour une application à une problématique réelle, seules les méthodes traitant les modèle parcimonieux peuvent être mise en œuvre à l'exemple du GMLA (*Gauss Marquardt Levenberg Algorithm*).

## 4.2.3 Approche choisie

En considérant toutes les contraintes citées précédemment, nous proposons d'utiliser une méthode d'optimisation non linéaire basée sur l'algorithme GMLA pour conjointement localiser la source et estimer les paramètres hydrauliques et de transport.

Afin de proposer une approche applicable à une problématique réelle, le champ de K, la dispersivité transversale  $\alpha_T$  et la position de la source seront considérés comme inconnus avec une source continue, ce qui est le cas sur la plupart des sites réels à l'échelle temporelle considérée (quelques années). D'après nos connaissances bibliographiques, aucune méthode basée sur le GMLA n'a été utilisée pour la localisation de la source. De plus, comme le problème comprend plusieurs incertitudes sur les paramètres et les observations, le deuxième objectif est d'utiliser l'ajout de données d'observations supplémentaires afin de limiter les incertitudes sur les paramètres. In fine le but est de réduire les incertitudes sur la position de la source en analysant les zones où l'ajout des observations permettront cette diminution . Ceci peut être réalisé à l'aide d'une approche dénommée *Data Worth* (DW). Le DW sera donc utilisé pour optimiser la localisation de nouveaux points de mesure. Des outils sont disponibles pour l'analyse DW à l'exemple de PREDUNC (Suite PEST) (Moore et al., 2010) ou encore de l'outil PYEMU développé par White et al. (2016).

## 4.2.4 L'analyse Data Worth dans la bibliographie

Le *Data Worth* a été largement étudié dans le domaine de l'hydrogéologie pour analyser l'ajout de données permettant de réduire les incertitudes sur des prédictions d'intérêt. Une prédiction d'intérêt est représentée par une valeur fournie par le modèle qui est la valeur recherchée. Ici, il peut s'agir de la position de la zone

Méthode	Référence	K field	α	Source
Opt. linéaire	Gorelick et al. (1983)	$\mathrm{Hm/C}$	С.	Trans.
Opt.	Wagner $(1992)$	$\mathrm{Hm/C}$	С.	Cont.
non	Mahar et Datta (1997)	$\mathrm{Hm/C}$	С.	Cont.
linéaire	Mahar et Datta (2000)	$\mathrm{Hm/C}$	С.	Trans.
	Sun et al. (2006)	$\mathrm{Ht/C}$	С.	Trans.
	Datta et al. $(2009)$	$\mathrm{Hm/I}$	I.	Trans.
	Bashi-Azghadi et al. (2016)	$\mathrm{Ht/I}$	I.	Trans.
Hybrides	Aral et al. (2001)	$\mathrm{Ht/C}$	С.	Trans.
	Singh et al. $(2004)$	$\mathrm{Hm/C}$	С.	Trans.
	Ayvaz (2016)	$\mathrm{Ht/C}$	С.	Trans.
	Xu et Gómez-Hernández (2016)	$\mathrm{Ht/C}$	С.	Trans.
	Xu et Gómez-Hernández (2018)	$\rm Ht/I$	С.	Trans.
Géostatistiques	Snodgrass et Kitanidis (1997)	$\mathrm{Hm/C}$	С.	Trans.
	Michalak et Kitanidis (2004a)	$\mathrm{Ht}/\mathrm{I}$	С.	Trans.
	Gzyl et al. $(2014)$	$\mathrm{Ht/I}$	С.	Trans.
	Butera et al. (2013)	$\mathrm{Ht/C}$	С.	Trans.
Transport	Bagtzoglou et al. (1992)	$\mathrm{Ht/C}$	С.	Trans.
inversé	Neupauer et Wilson (1999) Neupauer et Wilson (2005)	$\rm Ht/C$	С.	Trans.
	Michalak et Kitanidis (2004b)	$\rm Ht/Hm/C$	С.	Trans.
	Cupola et al. (2015)	$\mathrm{Hm/C}$	С.	Trans.

**Tableau 4.1 :** Récapitulatif des méthodes existantes pour la localisation de source (Hm : homogène, Ht : Hétérogène, C. : connu, I. : inconnu, Trans. : transitoire, Cont. : Continue).

source. L'analyse des prédictions d'intérêt est principalement utilisée avec les méthodes d'optimisation non linéaire (Freeze et al., 1992; James et Freeze, 1993; James et Gorelick, 1994). Des années 70 aux années 2000, différents groupes de recherche ont travaillé sur l'analyse du DW pour des problématiques de type hydrogéologiques (Dausman et al., 2010; Gates et Kisiel, 1974; Hill et al., 2013; Maddock, 1973) afin d'identifier les meilleures données pour réduire les incertitudes liées à la charge hydraulique ou à l'intrusion d'eaux saumâtres. D'autres auteurs ont utilisé le DW pour des problématiques hydrogéologiques en rapport avec la dépollution basées sur la localisation des meilleurs points pour mettre en place un Pump and Treat (Freeze et al., 1992; James et Gorelick, 1994; Tucciarelli et Pinder, 1991). Wallis et al. (2014) ont fait usage du DW pour des problèmes de transport en évaluant l'ajout de plusieurs données supplémentaires à partir d'un essai de traçage. Wöhling et al. (2016) ont étendu cette approche d'observations multiples en prenant en compte comme observation K et la charge hydraulique. L'objectif de cette étude a été de minimiser les incertitudes prédictives sur le temps de parcours des flux hyporhéiques. Vilhelmsen et Ferré (2017) ont travaillé sur un seul type de données d'observations, la conductivité hydraulique. Ils ont ainsi réalisé l'analyse DW pour sélectionner l'ajout de plusieurs observations pour réduire la ou les prédictions d'intérêt (charges hydrauliques et K). L'ajout des observations multiples a été testé à partir d'un algorithme génétique utilisé par Wöhling et al. (2016). Au total, 2500 nouveaux points de mesure potentiel ont été inclus et 1 million de combinaisons d'un maximum de 4 mesures sont considérées pour trouver la meilleure localisation des nouvelles données. Ce procédé n'est pas facile à mettre en œuvre pour un cas réel et demande un temps de calcul trop élevé.

## 4.3 Éléments théoriques et approche développée

#### 4.3.1 Stratégie globale

La stratégie globale repose sur une approche itérative visant à minimiser au fur et à mesure les incertitudes sur la position d'une source grâce à l'ajout de nouvelles observations. La stratégie peut être appliquée dans des situations réelles car elle ne nécessite l'ajout que d'un petit nombre de données supplémentaires dans le panache. En principe, elle est réalisée sur une ou deux campagnes d'échantillonnage. La Figure 4.1 présente de façon schématique cette stratégie adoptée. Un cycle correspond à une phase de localisation de source comprenant l'optimisation avec le GMLA, l'analyse du DW et l'ajout de nouvelles observations pour fournir de nouvelles données de charges hydrauliques et de concentrations. Pour chaque cycle, la méthode GMLA estimera les paramètres recherchés (champ de K, dispersivité  $\alpha_T$  et position de source) en incluant notamment des incertitudes sur ces paramètres et plus particulièrement sur la localisation de la source, que l'on nommera  $Y_s$ . Plus précisément,  $Y_s$  est la position de la source le



Figure 4.1 : Schéma de la stratégie itérative adoptée pour la localisation de source.

long d'une ligne perpendiculaire à l'écoulement. Ces incertitudes liées à  $Y_s$  sont analysées à partir du DW pour détecter les zones les plus propices à l'ajout de nouvelles observations susceptibles de réduire les incertitudes sur la position  $Y_s$ . Le paramètre  $X_s$  qui lui est la position de la source suivant l'écoulement, ne sera pas pris en compte. En effet, sachant que la dispersivité transversale est toujours nettement plus faible que la dispersivité longitudinal, le gradient de concentration est bien plus élevé dans la direction perpendiculaire au panacje. C'est pour cela que la méthode est plus sensible à la position de  $Y_s$  perpendiculaire à l'axe du panache.

#### 4.3.2 Localisation de source à l'aide du GMLA

#### Approche GMLA

La méthode Gauss-Marquardt-Levenberg Algorithm (GMLA) est une méthode d'optimisation non linéaire (utilisation du code PEST++) permettant de calibrer un modèle à partir de données d'observations en ajustant la valeurs de paramètres. En effet, le GMLA va réduire l'écart entre données observées et simulées en prenant en compte une équation que l'on appelle fonction objective (Equation 4.1), représenté par phi $\phi$ :

$$\phi = \sum_{i=1}^{m} [w_i(\sqrt{d_i^*} - \sqrt{d_i})]^2$$
(4.1)

Avec  $d_i^*$ , les données observées et  $d_i$ , les données simulées,  $w_i$ , le poids attribué aux observations. La méthode GMLA va chercher de manière itérative le meilleur jeu de paramètres pour atteindre la valeur minimale de  $\phi$ . Dans notre étude, les paramètres d'entrée sont le champ de K, la dispersivité  $\alpha$  et la coordonnée de la source  $Y_s$ . Afin de réduire le nombre de paramètres à identifier pour le champ de K, Marsily (1978) a proposé la méthode des points pilotes, qui est de type stochastique, consistant à déterminer le champ du logarithme de K à partir de points introduits sur le domaine de modélisation. Les valeurs sont calculées sur l'ensemble des mailles du domaine par interpolation. Cette méthode sera utilisée pour l'estimation du champ de K lors de l'utilisation du GMLA. A la suite de chaque étape du processus inverse du GMLA, le problème non linéaire est simplifié de la manière suivante :

$$\bar{d} = X \ \bar{p} + \epsilon \tag{4.2}$$

Avec  $\bar{d}$ , le vecteur des observations (charge hydraulique H ou concentration C),  $\bar{p}$ , le vecteur des paramètres à estimer et  $\epsilon$ , les erreurs potentielles de mesures ou du modèle. X représente l'effet du modèle à chaque étape de calibration, ayant comme dimension  $m \times n$  où m est le nombre d'observation et n le nombre de paramètres. A chaque étape d'optimisation, le vecteur  $\bar{p}$  est ajusté pour réduire l'écart entre données observées et simulées puis une mise à jour de X est faites à chaque itération pour prendre en compte la modification des paramètres. L'approche d'optimisation permet ainsi d'obtenir progressivement les paramètres au mieux les données pour une configuration de modèle donnée (valeur des points pilotes du champ de K,  $\alpha$  et  $Y_s$ ).

En raison des caractéristiques généralement inconnues d'un site contaminé (champ de K et paramètres du transport), le modèle doit prendre en compte un nombre de paramètres supérieur au nombre d'observations, ce qui est le cas sur la majeure partie des sites réels. Le système est dit sous-déterminé et ne possède pas de solution unique. Pour répondre à ce système et obtenir une solution optimale, des méthodes de régularisations sont utilisées telles que la régularisation de Tikhonov et le TSVD (*Truncated Singular Value Decomposition*). Le paramètre "Marquardt lambda" utilisé dans l'algorithme GMLA a aussi un effet de régularisation (Verardo, 2016; Welter et al., 2015).

L'approche générale est présentée sur la Figure 4.2. Le champ de conductivité hydraulique hétérogène est généré par krigeage dont le détail est expliqué dans la section 4.4. L'approche de la partie optimisation se décompose en deux parties successives avec :

- Etape 0: une première optimisation permettant d'estimer la valeur des points pilotes pour le champ de K en ne simulant que les charges H,
- Etape 1 : une seconde optimisation pour estimer tous les paramètres (hydrogéologiques et transport) en simulant toutes les observations (H et C). Dans cette deuxième étape, la valeur initiale des points pilotes correspond aux valeurs estimées à l'Etape 0.

#### Paramètres initiaux

Pour faciliter la résolution du problème par le GMLA, il est possible de définir pour chaque paramètre une limite inférieure et supérieure. Pour les points pilotes représentant des valeurs de conductivités hydrauliques, l'intervalle pris pour chaque paramètre correspond à une connaissance a priori des caractéristiques géologiques du site. Pour  $Y_s$ , l'intervalle peut correspondre à une distance potentielle entre deux points où la source peut être localisée. La dispersivité transversale  $\alpha_T$  (déduite de la dispersivité longitudinale qui est 10 fois supérieure) est plus complexe à estimer. Les limites choisies correspondent à l'estimation de la dispersivité liée à la taille du panache et à l'hétérogénéité du sédiment (Gelhar et al., 1992). De plus, les paramètres sont séparés en trois groupes différents (un pour les points pilotes, un pour  $\alpha_T$  et un pour  $Y_s$ ). Ceci permet d'affecter différentes valeurs de facteurs dans les équations de régularisation, donnant un poids plus ou moins important à chacun des groupes. Il est également possible de transformer la valeur des paramètres afin de stabiliser la variation entre ces mêmes paramètres. Une transformation en log 10 est effectuée pour les conductivités hydrauliques et la dispersivité.



**Figure 4.2 :** Approche de la méthode GMLA pour la localisation de source avec la Etape 0 et Etape 1.

#### Données d'observations

Les données d'observations utilisées pour l'analyse proviennent des données simulées de chaque cas synthétiques construits auxquelles des erreurs ont été ajoutées pour tenir compte de l'incertitude de la mesure (Mahar et Datta, 2001). L'ajout des erreurs est réalisé à partir de l'équation suivante (Singh et al., 2004):

$$d_{obs} = d_{sim} \ (1 + \gamma \ e) \tag{4.3}$$

Avec  $d_{obs}$ , la valeur observée pour l'analyse GMLA,  $d_{sim}$ , la valeur simulée par le cas synthétique,  $\gamma$ , pourcentage du bruit que l'on fixe à 10% pour les concentrations et 1% pour les charges, e un nombre généré aléatoirement via Excel Analysis ToolPack (suivant une distribution Normale, avec une moyenne = 0 et écart-type = 1).

Dans le fichier PEST++ initial, les observations sont séparées en deux groupes différents (C et H). Il est aussi possible de transformer ces observations pour rendre plus visibles les faibles valeurs de concentrations dans la fonction objectif. Dans notre cas, la transformation choisie est la racine carrée (Verardo, 2016). La fonction objectif globale sera égale à la somme des fonctions objectifs assignées à chaque groupe d'observation, avec un poids correspondant à chaque groupe. La valeur des poids de chaque groupe est ajusté en fonction des attentes de l'optimisation (adéquation acceptable pour les H et les C).

#### 4.3.3 Analyse du Data Worth

L'analyse du Data Worth permet de juger l'apport d'une nouvelle observation sur la variance d'une prédiction d'intérêt. Dans notre cas d'étude si l'on considère que la position de la source est notre prédiction d'intérêt, cette analyse peut nous aider à localiser les futures zones de forages pour limiter les incertitudes sur cette position de source. L'apport potentiel de chaque nouveau forage sera analysé par rapport à l'information qu'il permet d'ajouter, qui se traduit ici par la baisse de l'incertitude sur la prédiction  $Y_s$ .

#### Théorie

Soit le vecteur p désignant les paramètres du modèle et d les valeurs des observations (charges hydrauliques H et concentrations C). En considérant le théorème de Bayes, la distribution de probabilité a posteriori des paramètres du modèle selon les observations est définie par  $P_{(p/d)}$  avec :

$$P_{(p/d)} = \frac{P_{(p)} P_{(d/p)}}{\int P_{(d/p)} P_{(p)} dp}$$
(4.4)

Avec  $P_{(d/p)}$  la fonction de probabilité des observations,  $P_{(p)}$  la distribution a priori sur les paramètres (représentant la fonction du maximum de vraisemblance). En considérant l'Equation 4.2, l'Equation 4.4 et une distribution de type Gaussienne de p et  $\epsilon$ , le complément de Schur permet de définir la matrice de covariance des paramètres  $C_{(p/d)}$  a posteriori (White et al., 2016) avec :

$$C_{(p/d)} = C_{(p)} - C_{(p)} X^{t} [X C_{(p)} X^{T} + C_{(d)}]^{-1} X C_{(p)}$$
(4.5)

Avec  $C_{(p)}$  la matrice de covariance associée avec les paramètres a priori,  $C_{(d)}$  la matrice de covariance associée aux observations a priori.

Si l'on s'intéresse à une prédiction représentée par le vecteur  $\boldsymbol{s}$  avec :

$$s = y^T p \tag{4.6}$$

Où y est le vecteur de sensibilité de la prédiction d'intérêt pour chaque paramètre.

En considérant un modèle linéaire, résultant de la calibration, les Equation 4.5 et 4.6, il est possible de calculer la variance de l'incertitude prédictive d'une prédiction s (Dausman et al., 2010) avec :

$$\sigma_s^2 = y^T C_{(p)} y - y^T C_{(p)} X^t [X C_{(p)} X^T + C_{(d)}]^{-1} X C_{(p)} y$$
(4.7)

Dans l'équation 4.7, le terme  $y^T C_{(p)} y$  représente les incertitudes associées à la prédiction avant la calibration. Le deuxième terme, représente la diminution de l'incertitude obtenue après calibration.

L'Equation 4.7 est linéaire, mais les équations du transport conduisent à un problème non linéaire dont les éléments de la matrice X sont dépendants de la valeur des paramètres p. Pour répondre à cette non linéarité, X est en fait représenté par la matrice des sensibilités entre paramètres et observations (la matrice Jacobienne) obtenue après calibration (Vilhelmsen et Ferré, 2017). Ainsi, ce ne sont pas directement les valeurs d'observations et de paramètres qui sont pris en comptes mais plutôt les covariances et la jacobienne.

En effet, pour calculer  $\sigma_{dec}^2$ , prenant en compte les nouvelles observations, Vilhelmsen et Ferré (2017) ont défini la matrice Jacobienne complète  $X_{all}$ , attachée à la prédiction d'intérêt y:

$$X_{all} = \begin{bmatrix} y^T \\ X_{base} \\ X_{nd} \end{bmatrix}$$
(4.8)

Avec  $X_{all}$ , la Jacobienne complète comprenant la prédiction d'intérêt  $y^T$ ,  $X_{base}$  la Jacobienne basique contenant les données initiales pour la calibration et  $X_{nd}$  la Jacobienne contenant les nouvelles observations à chaque ligne de la matrice.

Ensuite, Vilhelmsen et Ferré (2017) ont utilisé le terme DW pour définir le Data Worth avec :

$$DW = \frac{\sigma_{dec}^2}{\sigma_{base}^2} \tag{4.9}$$

Où  $\sigma_{dec}^2$  définissant la valeur de la variance de la prédiction d'intérêt après ajout des nouvelles observations et  $\sigma_{base}^2$  définissant la valeur de la variance de la prédiction d'intérêt sur les observations existantes (de base) au départ de l'analyse. DW est donc compris entre 0% et 100 %. Pour une observation fictive ajoutée, si la valeur *DW* est proche de 100%, aucune diminution n'a été notée et donc l'observation ajoutée (ou une zone du domaine d'observations ajoutées) ne permettra pas de diminuer l'incertitude sur la prédiction d'intérêt. Au contraire, si celle-ci est proche de 0, l'observation ajoutée aura tendance a diminuer l'incertitude sur la prédiction. Pour une meilleure compréhension, nous allons nous baser sur la valeur (1 - DW), ce qui signifiera que lorsque la valeur est proche de 100%, l'observation conduira à une forte diminution de l'incertitude sur la prédiction.

#### Application du *Data Worth* dans la localisation de la source

En ajoutant un certain nombre d'observations fictives dans la matrice Jacobienne (matrice Jacobienne complète définie par Vilhelmsen et Ferré (2017)), la valeur de la variance de la prédiction d'intérêt sur chacune des nouvelles observations est calculée. Le nombre d'observations fictives dépend du domaine d'étude pouvant correspondre à une observations par cellule du domaine.

Il est donc possible de réaliser une carte de variances liées à une prédiction d'intérêt et donc d'avoir une valeur de (1 - DW) sur tout un domaine. Plus la valeur (1 - DW) sur un point sera élevée, plus ce point permettra de diminuer l'incertitude liée à cette prédiction. Dans notre cas, la prédiction d'intérêt est la position de la source. Les données existantes sont représentées par les valeurs de concentrations en contaminant. Ainsi, l'analyse du *Data Worth* permettra d'identifier les zones où l'on peut ajouter de nouvelles observations, là où de futurs forages peuvent être réalisés.

Pour appliquer le Data Worth, l'analyse de l'ajout de nouvelles observations est menée à l'aide de l'outil PyEMU (White et al., 2016). PyEMU est basé sur un script Python. L'outil PyEMU calcule donc la variance  $\sigma_{dec}^2$  associée à chacune de ces cellules. Ensuite, la variable (1 - DW) est calculée dans le but de représenter les zones où les valeurs seront les plus fortes, zones où les nouvelles observations permettront de réduire l'incertitude sur  $Y_s$  selon le modèle actuel.

## 4.3.4 Choix des nouvelles observations par itération

Le nombre d'observations à ajouter après chaque phase a été fixé à 3. En effet, pour des raisons opérationnelles, il n'est pas raisonnable de faire une seule campagne pour 1 forage et dans l'autre sens, pour un modèle donné, des expériences préliminaires ont montré qu'il y avait peu de zones avec des incertitudes élevées. Le premier point choisi correspondra à la zone où la valeur (1 - DW) sera la plus forte. Le problème se pose sur le choix du 2<sup>ème</sup> et 3<sup>ème</sup> point d'observation. Vilhelmsen et Ferré (2017) ont utilisé une méthode permettant de choisir une combinaison d'observations multiples avec une procédure de recherche aléatoire basée sur le DW (2500 points potentiels sur 1 million de combinaisons). Cherchant à développer un outil applicable à un site réel (réduction de temps), nous souhaitons fixer le nombre d'observations à ajouter sans procédure aléatoire. De ce fait, lorsque le premier point p1 est choisi, l'objectif est de sélectionner le 2<sup>ème</sup> point p2 dans une zone où la concentration qui sera mesurée sur p1 n'a aucune influence. Pour cela, nous nous sommes basés sur une approche géostatistique. En considérant que les concentrations d'un panache sont corrélées entre elles, le variogramme directionnel est calculé en fonction du panache obtenu. Nous définissions alors une ellipse P(xP, yP, rx, ry) ayant le point p1 comme centre, qui sera la zone interdite car présentant une adéquation avec ce même point. Les dimensions rx et ry de l'ellipse correspondent au 2/3 de la portée du variogramme correspondant (Doherty, 2010). La localisation du point p2 sera donc située à l'extérieur de l'ellipse P1 au point où la valeur (1 - DW) sera la plus forte. Ensuite, le point p3 sera sélectionné selon la même procédure, à l'extérieur des ellipses P2 et P1 liées aux points obtenus précédemment.

## 4.4 Localisation de la source sur le Cas A

## 4.4.1 Construction du modèle synthétique

Le cas synthétique a été réalisé à partir des codes de calcul MODFLOW et MT3DMS. Le domaine du Cas A a une dimension de  $200 \times 50$  m. Le modèle comprend des cellules de 1 m dans la direction y et 5 m dans la direction x.

#### Paramètres hydrodynamiques

Les conditions limites (Dirichlet) ont été placées en amont et aval du domaine (Ouest et Est) avec respectivement une valeur de 10.50 m et 10.00 m (gradient de 0.0025). Le champ de K a été créé à partir de 52 points pilotes distribués régulièrement dans tout le domaine avec une distance de 15 m entre deux points pilotes. La valeur de K des points pilotes a été générée de manière aléatoire en étant compris entre 3 à 300 m.jour<sup>-1</sup> (Figure 4.3) (distribution homogène de logK). Ensuite, un krigeage utilisant un variogramme de type sphérique avec une portée de 25 m a été utilisé pour générer le champ de K.

#### Paramètres du transport et de la source

La source a été placée comme le montre la Figure 4.3 avec une valeur de concentrations de 10 mg.L<sup>-1</sup>. La dispersivité longitudinale  $\alpha_{TA}$  est de 0.3 m (dispersivité longitudinale  $\alpha_{TA} = 3$  m. Le centre de la source est situé à un  $X_A = 14$  m et  $Y_A = 29$  m. La source a une largeur de 2 m selon l'axe des y.  $Y_s$  est utilisé comme paramètre définissant le centre de la source. Les conditions utilisées pour la simulation sont celles d'un régime permanent en écoulement et en transport, avec une source continue.

#### Données observées utilisées

Initialement, 10 observations ont été ajoutées (p1 à p10) de façon à avoir des points non idéalement placés par rapport au panache. Le but est d'avoir un cas proche de la réalité sachant qu'au début de chaque étude d'un site contaminé, les puits existants sont, dans la plupart des cas, très mal placés. Des erreurs ont été ajoutées à chaque valeur simulée sur ces points à partir de l'Equation 4.3 afin de les utiliser en tant que valeurs d'observations.



Figure 4.3 : Modèle de base du Cas A construit pour la localisation de source.

## 4.4.2 Implémentation du GMLA

#### Paramètres initiaux

Les paramètres initiaux implémentés dans les fichiers PEST++ sont présentés sur le Tableau 4.2 (page 78). Une première calibration est réalisée seulement avec les observations de charge hydraulique H afin d'obtenir la meilleure estimation des valeurs de points pilotes (correspondant à l'Etape 0). Les valeurs de charge H ne

sont pas transformées à cette étape. Une fois l'Etape 0 calibrée (NRMSE - H < 5%), la seconde optimisation est réalisée avec (i) les valeurs de H et C séparées en deux groupes d'observations différents, (ii) les valeurs de paramètres initiaux  $Y_s$ ,  $\alpha_T$  et les points pilotes du champ de K, en trois groupes de paramètres différents. Les valeurs des points pilotes estimées lors de la première calibration sont utilisées comme valeurs initiales pour la seconde optimisation avec toutes les données H et C (Etape 1 sur la Figure 4.2).

#### Régularisation

Pour faciliter l'estimation des paramètres, des méthodes de régularisation sont utilisées dans la calibration avec (i) la régularisation de Tikhonov et (ii) le TSVD. Lors de l'Etape 1 (cf. Figure 4.2), dans la régularisation de Tikhonov, un poids plus important est implémenté sur  $Y_s$  et  $\alpha_T$  afin de les rendre plus sensibles lors de la calibration. Le TSVD utilise une troncature  $5.10^{-7}$ .

## 4.4.3 Résultats

#### Phase 1

La Phase 1 est basée sur 10 points d'observation. Une première calibration a donc été réalisée en Etape 0 seulement avec les données de charge H afin d'estimer les valeurs des points pilotes. Ensuite, en plus des points pilotes, le paramètre source  $Y_s$  et la dispersivité transversale  $\alpha_T$  sont ajoutés au fichier de base pour l'optimisation. Les valeurs initiales sont présentées sur le Tableau 4.2. Afin d'évaluer la calibration du modèle et l'efficacité de la localisation de la source, les critères RMSE (racine carré de la variance des résidus) et NRMSE (le coefficient de variation) seront utilisés (cf. Section 4.1.4). Le coefficient de variation NRMSE pris en compte dans l'étude est égal au rapport entre la RMSE et la différence entre le maximum et le minimum des données observées. Afin de ne pas être trop restrictif dans notre étude, la NRMSE de H devra être inférieure à 5% et le NRMSE de C inférieur à 15%.

L'optimisation de la Phase 1 donne un  $Y_s$  égal à  $30.84 \pm 5.32$  m et une dispersivité transversale  $\alpha_T = 0.27 \pm 0.12$  m. La RMSE entre données observées et simulées pour H et C sont respectivement de 0.001 m et de 0.0007 mg.L<sup>-1</sup>. L'adéquation entre les données observées et simulées est présentée sur la Figure 4.4. Le coefficient de variation pour les données H et C est très faible et inférieur à 0.5%, donnant une très bonne adéquation.

#### Analyse DW et choix des nouveaux points

Une fois la calibration réalisée, le but est d'analyser le DW lié à  $Y_s$ . DW est calculé à partir de l'optimisation de la Phase 1 pour une nouvelle observation située dans chacune des cellules du domaine (représentant environ 2000 points), afin d'avoir une carte représentant (1-DW) sur toute la zone concernée. La carte réalisée,



Figure 4.4 : Adéquation entre données simulées et données observées lors de la Phase 1 du cas A. En bleu les données H et en rouge les données C.

permet de localiser le premier point à ajouter pour diminuer les incertitudes liées à  $Y_s$ . Pour ce cas précis, nous considérerons que tout nouveau point d'observation doit être situé à un x supérieur à 25 m (Figure 4.5), afin d'illustrer la contrainte de présence d'un bâtiment ou d'une zone non accessible, très courante sur site réel (sur un site en activité les zones sources sont sous l'usine).

Le premier point correspondant à la plus forte incertitude est situé sur les coordonnés [25; 30] (le point p11 sur la Figure 4.5). Les variogrammes directionnels (en x et y) calculés à partir du panache simulé dans la Phase 1, permettent de dessiner l'ellipse  $P_A(xP_A, yP_A, rx_A, ry_A)$  avec  $xP_A, yP_A$ , les coordonnées du centre de l'ellipse correspondant au point p11. Les valeurs  $rx_A = 14$  m,  $ry_A = 5$  m correspondent au 2/3 de la portée du variogramme directionnel correspondant. Le second point p12 est localisé à l'extérieur de cette ellipse à une coordonnée de [25; 36.5] où l'incertitude est la plus forte. Enfin, le troisième point se trouve à l'extérieur des deux premières ellipses à une coordonnées de [38; 32.5] (Figure 4.5). Les points p11, p12 et p13 sont utilisés pour la Phase 2.

#### Phase 2 : résultat final

Tout comme la Phase 1, une première calibration est effectuée, cette fois ci avec les 13 données de charges hydrauliques afin d'avoir la première calibration de l'Etape 0. Les valeurs de paramètres estimées sont ensuite utilisées en tant que valeurs initiales pour l'Etape 1 (avec H et C). La seconde calibration prenant en compte tous les paramètres donne une valeur de  $Y_s = 30.7 \pm 2.29$  m et de  $\alpha_T$  de 0.29  $\pm$  0.11 m, valeurs proches de celles de la Phase 1. Les RMSE obtenues pour H et C sont respectivement de 0.0015 m et de 0.002 mg.L<sup>-1</sup> (NRMSE toujours inférieur à 0.5%). L'adéquation entre les données simulées et observées est présentée sur la Figure 4.6.



Figure 4.5 : Carte des incertitudes liées à  $Y_s$  du cas A pour la Phase 1 et Phase 2. En noir, les ellipses délimitant les zones à forer là où le point ajouté n'a aucune influence.



Figure 4.6 : Adéquation entre données simulées et données observées lors de la Phase 2 du cas A. En bleu les données H et en rouge les données C.

#### 4.4.4 Comparaison Phase 1 et Phase 2

La Figure 4.5 montre la carte des incertitudes (1-DW) pour les Phases 1 et 2 avant et après ajout des nouvelles observations. Ainsi, la stratégie itérative a permis de diminuer les incertitudes liées à  $Y_s$  et de légèrement diminuer les écarttypes de  $Y_s$  et de la dispersivité comme le confirme les distributions a posteriori illustrées sur la Figure 4.7. Il faut tout de même noter que dès la première phase, les résultats étaient proches des valeurs du cas synthétique. Soulignons cependant, que l'on n'atteint pas les valeurs exactes de position de source (même si elle est très proche) alors que la valeur de dispersivité est quasiment atteinte, celle-ci devant être plus sensible. De plus l'adéquation entre valeurs observées et simulées sont très élevées avec des valeurs de RMSE très faibles pour la Phase 1 et 2. Ceci met en évidence la question de l'équifinalité, autour de la solution exacte, il y a de très nombreux panaches avec des positions de sources proches, qui donnent des valeurs de concentrations quasiment égales.



Figure 4.7 : Distribution a posteriori de  $Y_s$  et  $\alpha_L$  du cas A pour la Phase 1 et 2.

## 4.5 Localisation de la source sur le Cas B

#### 4.5.1 Construction du modèle synthétique

Le domaine du cas B a une dimension de 400  $\times$  100 m. Le modèle a été construits à partir de cellules de 1 m dans la direction y et 5 m dans la direction x.

#### Paramètres hydrodynamiques

La condition limite a été placée en amont (à l'Ouest) avec une charge hydraulique de 14 m et 10 m en aval (gradient hydraulique de 0.01). La génération du champ de K a été effectuée à partir de 24 points pilotes distribués aléatoirement dans un sous-domaine de 200 × 50 dans le domaine global de 400 × 100 (Figure 4.8). Une interpolation utilisant les polygones de Thiessen est ensuite appliquée pour générer le champ de K avec des valeurs comprises entre 3 et 300 m.jour<sup>-1</sup>.

#### Paramètres du transport et de la source

La source d'une largeur de 2 m et une valeur de 10 mg.L<sup>-1</sup> a été placée à une coordonnée  $X_B = 101$  m et  $Y_B = 61$  m (Figure 4.8). La valeur de  $\alpha_{LB}$  est de 1.80 m donnant une valeur de  $\alpha_{TB} = 0.18$  m. Ce cas est beaucoup plus complexe car le champ de K généré par les polygones donne une hétérogénéité du milieu beaucoup plus forte et plus difficile à décrire, notamment à l'aide de krigeage.

#### Données observées utilisées

Tout comme le cas A, 10 observations ont été ajoutées (p1 à p10) de façon à avoir des points non idéalement placés par rapport au panache. Des erreurs sur les données simulées ont été ajoutées pour les considérer comme observations.



Figure 4.8 : Modèle de base du Cas B construit pour la localisation de source.

## 4.5.2 Implémentation du GMLA

Les paramètres et la régularisation utilisés sur le cas B sont les mêmes que ceux du cas A. Il en est de même pour la méthode mise en place (Etape 0 avec H et Etape 1 avec C et H). L'ensemble des paramètres est présenté sur le Tableau 4.2.

#### 4.5.3 Résultats

#### Phase 1

L'optimisation de la Phase 1 a donné une valeur de  $Y_s = 56.23 \pm 1.90$  m et  $\alpha_T = 0.05 \pm 0.14$  m. Les RMSE de H et C sont respectivement de 0.01 m et de 0.33 mg.L<sup>-1</sup> donnant une adéquation entre valeurs observées et simulées moins bonne que le cas A mais qui reste tout de même acceptable (Figure 4.9). En effet, les coefficients de variation NRMSE - H est égal à 1.36% et NRMSE - C est égal à 10%.



**Figure 4.9 :** Adéquation entre données simulées et données observées lors de la Phase 1 du cas B. En bleu les données H et en rouge les données C.

#### Analyse DW et choix des nouveaux points

Le DW est calculé à partir des paramètres estimés à la Phase 1 sur chacune des cellules du modèle. Dans ce cas, et pour minimiser le temps de calcul, un sous domaine de 3000 points a été choisi pour représenter la carte des incertitudes.

Sur ce cas B, les nouvelles observations doivent être localisées à une valeur de x supérieure à 125 m pour contraindre le modèle (Figure 4.12). Le premier point nommé p11 est localisé à la coordonnée de [125; 55]. L'estimation des variogrammes directionnels à partir des concentrations simulées donne une ellipse  $P_B(xP_B, yP_B, rx_B, ry_B)$  ayant pour dimension  $rx_B = 33$  m,  $ry_B = 11$  m. Le point p12 est donc localisé à la coordonnée de [160; 55] et p13 est localisé à [190.5; 50.5] (cf. Figure 4.12). Les points p11, p12 et p13 sont utilisés pour la Phase 2.

#### Phase 2

La calibration donne un  $Y_s = 61.89 \pm 1.67$  m et  $\alpha_T = 0.05 \pm 0.14$  m. Les RMSE de H et C sont respectivement de 0.07 m et 0.33 mg.L<sup>-1</sup> (adéquation sur Figure 4.10). Les coefficients de variation sont de 3.39% pour les données H et de 9.6% pour les données C. Néanmoins, la carte de (1-DW) de la Phase 2 (Figure 4.12), montre toujours d'importantes incertitudes sur  $Y_s$ . C'est pour cela qu'une 3<sup>ème</sup> phase est proposée, incluant une nouvelle fois l'ajout d'observations.

#### Analyse DW et choix des nouveaux points

L'analyse DW est donc calculée à partir des paramètres estimés à la Phase 2. Le premier point p14 est localisé à la coordonnée [125.5; 66.5]. D'après le variogramme directionnel, l'ellipse a les même dimensions que celle utilisée lors de la Phase 1 ( $rx_B = 33$  m,  $ry_B = 11$  m). Le second point p15 est localisé à la coordonnée [159.5; 68.5] et le troisième point p16 à la coordonnée [192.5; 65.1]. Les points p14, p15 et p16 sont utilisés pour la Phase 3.

GROUPES DE PARAMÈTRES		Cas A	Cas B	
Kpp	Nombre	52		
	Portée du variogramme	25		
	min - max (m.jour <sup>-1</sup> )	3-300		
	Transformation	$\log$		
	Type d'incrément	relatif		
	Valeur de l'incrément	0.01		
$\alpha_L$	min - max (m)	0.1-10		
	Transformation	$\log$		
	Type d'incrément	relatif		
	Valeur de l'incrément	0.01		
$Y_s$	min - max (m)	10-40	20-70	
	Transformation	au	cune	
	Type d'incrément	absolu		
	Valeur de l'incrément	1.00		
GROUPES D'OBSERVATIONS		Cas A	Cas B	
H	Nombre		10	
	Transformation	Racine		
C	Nombre		10	
	Transformation	Ra	acine	

**Tableau 4.2 :** Paramètres initiaux utilisés dans l'optimisation GMLA pour chaquegroupe de paramètres et d'observations.

#### Phase 3 : résultat final

Les résultats de l'optimisation donnent une valeur de  $Y_s = 64.51 \pm 0.37$  m et une  $\alpha_T = 0.15 \pm 0.1$  m. Les RMSE de H et C sont respectivement de 0.09 m et 0.38 mg.L<sup>-1</sup>. Les NRMSE correspondant sont de 4.15% pour H et 7.86% pour C. Cette dernière est moins élevées que lors de la Phase 2.



Figure 4.10 : Adéquation entre données simulées et données observées lors de la Phase 2 du cas B. En bleu les données H et en rouge les données C.



Figure 4.11 : Adéquation entre données simulées et données observées lors de la Phase 3 du cas B. En bleu les données H et en rouge les données C.

#### 4.5.4 Comparaison Phase 1, Phase 2 et Phase 3

Les trois cartes des incertitudes liées à  $Y_s$  pour les trois phases sont présentées sur la Figure 4.12. Pour ce cas plus complexe, il a fallu trois phases pour diminuer les incertitudes liées à  $Y_s$  et avoir un écart-type plus faible représenté par la distribution a priori des paramètres illustrée sur la Figure 4.13.



**Figure 4.12 :** Carte des incertitudes liées à  $Y_s$  du cas B pour les trois phases. En noir, les ellipses délimitant les zones à forer là où le point ajouté n'a aucune influence.



**Figure 4.13 :** Distribution a posteriori de  $Y_s$  et  $\alpha_L$  du cas B pour les trois phases.

## 4.6 Récapitulatif des résultats et discussions

#### 4.6.1 Résultats obtenus pour chaque cas

Le Tableau 4.3 synthétise l'ensemble des résultats obtenus pour la localisation de source sur les cas synthétiques. Le cas A, exemple le plus simple, présente de très bons résultats, du fait de sa construction, beaucoup plus simple que le cas B. En effet, l'interpolation des points pilotes utilisée lors des phases de modélisation du cas A, est la même que celle utilisée pour la construction du cas (même nombre de points pilotes, même type de krigeage). Ce premier cas simple a surtout permis d'établir la méthodologie sur un cas facilement réalisable, donnant de faibles NRMSE et une bonne estimation des paramètres ( $Y_s$  et  $\alpha_L$ ).

Au contraire, pour le cas B, la méthode de construction du champ de K est différente de celle utilisée pour la localisation de source, ce qui ajoute plus d'erreurs dans le calage des observations et la localisation de source. Ce cas est beaucoup plus proche des hétérogénéités qui peuvent être rencontrées dans un cas réel. Les NRMSE du cas B sont en effet plus élevées que celles du cas A mais restent acceptables d'après la norme ASTM et  $Y_s$  final est légèrement éloignée de la valeur réelle. En effet, le résultat final donne une localisation de source  $Y_s$  à environ 64 m (au lieu de 61 m), avec un faible écart-type. L'erreur peut venir du fait que le panache venant de  $Y_s$  égal à 61 m tourne avant la zone que nous avons fixé pour l'ajout de nouveaux points. Le modèle ne peut pas simuler un virage du panache avant la zone autorisée de prélèvement (cf. Figure 4.14).



**Figure 4.14 :** Position du panache simulé (rouge) et du panache réel (bleu). Notons que le panache réel en bleu, tourne avant la zone de prélèvement autorisée, rendant difficile la localisation de source.

## 4.6.2 Comparaison des champs de K

Pour aller plus loin dans l'analyse, les Figures 4.15 et 4.16 montrent une comparaison des champs de K réels et ceux estimés pour chaque cas. Le troisième champ de K représenté sur chaque figure, a été estimé en considérant la position de la source et la dispersivité comme étant connues. Seules les valeurs des points pilotes ont été estimées. Ceci permet d'avoir le champ de K optimum estimé par la méthode GMLA. Ainsi, les champs de K associés à la localisation de la source sont très proches des champs de K calibrés en considérant les paramètres du transport comme connus, prouvant (i) la fiabilité des résultats et (ii) que la localisation de la source n'a pas stagnée dans un minimum local lors de la phase d'optimisation.

Si l'on compare les champs de K estimés avec le champ réel, les valeurs absolues ne sont pas les mêmes. Ceci ne pose pas de problème en soi, car la modélisation a été réalisée en régime permanent. Néanmoins, si nous nous intéressons au ratio K fort et faible, il est possible d'établir une similitude. Il apparait ainsi que pour chaque cas, la calibration permet de retrouver les zones où les K sont les plus forts ou les plus faibles. Les zones similaires sont entourées en pointillé sur les Figures 4.15 et 4.16. Cette analyse conforte les résultats obtenus précédemment.

	Cas A			Cas B			
	Réel	Phase 1	Phase 2	Réel	Phase 1	Phase 2	Phase 3
$Y_s$	29	30.84	30.7	61	56.23	61.89	64.51
		$\pm 5.32$	$\pm 2.29$		$\pm 1.90$	$\pm 1.67$	$\pm 0.37$
		(15)	(30.84)		(40)	(56.23)	(61.89)
$\alpha_L$	3	2.65	2.95	1.8	0.51	0.49	1.47
		$\pm 1.16$	$\pm 1.09$		$\pm 1.38$	$\pm 1.38$	$\pm 1.04$
		(7)	(2.65)		(3)	(0.51)	(0.49)
RMSE	H (m)	0.001	0.0015	-	0.01	0.07	0.09
NRMS	E H	$<\!0.5\%$	$<\!0.5\%$	-	1.36%	3.39~%	4.15~%
RMSE $C$ (mg.L <sup>-1</sup> )		0.0007	0.002	-	0.33	0.33	0.38
NRMSE $H$		$<\!0.5\%$	$<\!0.5\%$	-	10%	9.6%	7.86%

Tableau 4.3 : Résultats obtenus des optimisations réalisées sur le cas A et B. Les
valeurs entre parenthèses sont les paramètres a priori utilisées en début de chaque
calibration.
# 4. MODÉLISATION NUMÉRIQUE POUR LA LOCALISATION D'UNE ZONE SOURCE : APPLICATION SUR CAS SYNTHÉTIQUES



Figure 4.15 : Comparaison du cas A entre le champ de K réel, le champ de K estimé lors de la phase finale et le champ de K optimal si la source et la dispersivité étaient connus. Les zones en pointillé représentent les zones similaire entre les trois champs de K.



**Figure 4.16 :** Comparaison du cas B entre le champ de K réel, le champ de K estimé lors de la phase finale et le le champ de K optimum si la source et la dispersivité étaient connus. Les zones en pointillé représentent les zones similaire entre les trois champs de K.

# 4.6.3 Discussion générale sur la stratégie de localisation de source sur deux cas synthétiques

Ce chapitre a présenté le développement et l'application d'une stratégie de localisation de source sur deux cas synthétiques. La méthode mise en place a été utilisée de façon à être applicable à une problématique réelle avec :

- l'ajout limité de nouvelles observations pour diminuer les incertitudes sur la localisation de la source,
- des contraintes spatiales pour cet ajout de données pouvant advenir sur un site réel,
- la prise en compte d'une source en régime permanent (panache stabilisé) sans connaissance de l'historique de la contamination,
- des caractéristiques sur l'hydrogéologie (champ de conductivité hydraulique K) et le transport (dispersivité  $\alpha$ ) non connues.

L'étude bibliographique a permis de constater que les travaux sur la localisation de la source sont en général efficaces lorsque l'évolution d'un panache est prise en compte (historique des polluants sur un ou plusieurs points). Un panache stabilisé est plus complexe à analyser et dans les problématiques réelles, ce sont ces cas de figures qui sont rencontrés. N'ayant pas été utilisée à notre connaissance, notre choix s'est porté sur une optimisation non linéaire utilisant le GMLA à partir de l'application PEST++. La possibilité d'estimer de manière optimale, une source stabilisée, la localisation  $Y_s$ , la dispersivité  $\alpha$  et le champ de K a principalement orienté le choix sur PEST++. Non exposé dans le chapitre, durant les travaux de recherche, une méthode de type "Monte-Carlo" a été testée afin de la comparer au GMLA. Celle-ci consistait à un balayage d'une multitude de scenarii prenant en compte (i) 200 champs de K générés aléatoirement, (ii) plusieurs valeurs de  $Y_s$  (50 positions sur un transect de 50 m), (iii) et 10 valeurs de dispersivité  $\alpha_T$ . La méthode a été abandonnée du fait de son coût très élevé (temps de calcul trop long) et des résultats qui n'étaient pas meilleurs que le GMLA.

En terme de résultats, la stratégie de modélisation avec le GMLA a permis d'estimer la localisation de la source  $Y_s$ , la dispersivité  $\alpha_T$  et le champ de K avec de faibles écart-types pour chacun des cas synthétiques. En amont de la calibration, les poids assignés à chaque groupe d'observations (C et H) permettent de rendre plus ou moins visible le groupe en question. Il n'existe pas à notre connaissance de méthode théorique pour définir les poids de chaque groupe. Néanmoins, pour cette analyse, les poids ont à chaque fois été adaptés pour rendre la visibilité des concentrations meilleure tout en gardant les charges hydrauliques visibles. Plusieurs essais ont été effectués, en ciblant un poids toujours supérieur pour les concentrations avec ratio entre C et H différent. Malgré ces différents ratios de poids, l'estimation donne des valeurs de  $Y_s$  identiques à la valeur de base pour le cas A et le cas B. De plus, nous pouvons noter que d'un point de vue général, les valeurs de  $Y_s$  entre les différentes phases changent peu. Néanmoins, les écart-types associés sont sensibles à l'ajout des nouvelles observations avec une diminution au fur et à mesure des phases. Par ailleurs, la position de la source  $Y_s$  estimée lors de la Phase 3 du cas B est légèrement supérieure (64.5 m) à la valeur de référence (61 m). Ce résultat s'explique par la contrainte imposée sur les zones d'observations à ajouter (Cf. Figure 4.14). En effet, si le panache tourne avant la zone d'observation autorisée, la capacité à retrouver la vraie source est limitée, faussant l'écart-type qui devrait être plus important.

Les cartes des incertitudes montrent peu d'effets de l'ajout des observations à chaque phase. L'intérêt d'ajouter de nouvelles observations à partir du Data Worth apparait plutôt en analysant plus précisément la jacobienne (matrice de sensibilité des paramètres en fonction des observations) calculée lors de la dernière optimisation de chaque phase. Les valeurs des sensibilités du paramètre  $Y_s$  (extrait de la jacobienne) sont présentées dans le Tableau 4.4. Plus précisément le tableau présente une partie des 10 valeurs les plus sensibles (en vert) et les moins sensibles (en rouge) pour chaque observation parmi tous les paramètres associés  $(Y_s, \alpha \text{ et tous les points pilotes})$ . Seules les sensibilités de  $Y_s$  sont présentées. Ainsi, il peut être noté que, sur le cas A, l'ajout des nouvelles observations en Phase 2 a permis de positionner de nouveaux points très sensibles à  $Y_s$ , facilitant la localisation de source. Sur le cas B, la situation est plus complexe : il est intéressant de constater que les points p3, p7 et p8 restent sensibles tout au long de l'étude car ils sont situés au nord du panache dans la bordure de celui-ci. Par contre, lors de la Phase 2 les points ajoutés ne sont pas sensibles, ce qui apparaît contraire à ce qui avait été estimé par la phase de DW. Ceci résulte du fait que le DW suppose que le modèle est linéaire et correct dans tout l'espace, ce qui n'est pas vrai en présence d'un champ de conductivité hydraulique hétérogène. Lors du passage de la Phase 2 à la Phase 3, les points ajoutés deviennent sensibles. Ceci peut provenir du fait que l'ajout des points dans la Phase 2 a nettement mieux défini les écoulements proche de la source. Le modèle devient plus proche des conditions nécessaire à l'application correcte de l'approche DW. Pour ce qui est de l'estimation du champ de K, l'optimisation a principalement permis d'établir les zones de fortes et de faibles conductivités hydrauliques.

La méthode développée est intéressante pour la localisation d'une source de contaminants et reste applicable à un cas réel. Néanmoins, malgré la prise en compte des hétérogénéités sur les cas synthétiques étudiés, ceux-ci restent simples. Dans la réalité, il est possible d'avoir plus de paramètres à prendre en compte telles que de potentielles recharges (précipitations, hautes et basses eaux) ou de dégradations de polluants. Aussi, il est possible d'avoir plusieurs sources. Cette problématique pourrait faire partie des perspectives de développement de la méthode. Afin d'évaluer cette stratégie de localisation de source, l'application sur site réel a été testée dans le Chapitre 5.

**Tableau 4.4 :** Sensibilité de la source  $Y_s$  sur chacune des observations (Jacobienne calculée en fin d'optimisation). Les valeurs en rouge sont les points ayant la sensibilité la plus faible parmi tous les paramètres (points pilotes,  $Y_s$  et  $\alpha$ ). En vert, il s'agit des sensibilités les plus fortes.

	Cas A		Cas B			
	Phase 1	Phase 2	Phase 1	Phase 2	Phase 3	
P1	0.05	0.062	-0.084	-0.034	-0.019	
P2	-0.08	-0.08	-0.12	-0.069	-0.044	
P3	-0.012	-0.007	0.12	0.07	0.045	
P4	-0.012	-0.009	0.032	0.045	0.018	
P5	-0.041	-0.027	-0.095	-0.053	-0.033	
P6	-0.026	-0.01	-0.041	-0.022	-0.014	
P7	0.018	0.029	0.14	-0.092	0.083	
P8	0.021	0.034	0.083	0.063	0.059	
P9	-0.044	-0.033	-0.024	-0.03	-0.092	
P10	-0.027	-0.019	0.0039	0.015	0.019	
P11		0.22		-0.076	-0.074	
P12		0.2		-0.14	-0.025	
P13		0.14		-0.02	-0.015	
P14					0.092	
P15					0.11	
P16					0.092	

Chapitre 5

# Application de la stratégie de localisation de source sur site réel

# 5.1 Objectifs

Dans le cadre des travaux de recherche, un site d'un des partenaires du consortium INNOVASOL a été choisi afin d'évaluer la stratégie de localisation de source sur un cas pratique. Cette stratégie a été mise en place à partir de données existantes, de campagnes de prélèvements et de campagnes de forages. Des mesures de vitesses au DVT ainsi que des mesures de concentrations à l'aide du Préleveur Ciblé (PC) ont été réalisées afin d'évaluer les flux massiques de la zone d'étude. L'intégralité des tests et des résultats du site sont présentés dans ce chapitre. Cette stratégie est ensuite comparée à une campagne HRSC réalisée à la Geoprobe MIP-HPT (*Membrane Interface Probe - Hydraulic Profiling Tool*).

Le site a fait l'objet de plusieurs études relatives à la qualité du sol et des eaux souterraines ces vingt dernières années. Les diagnostics et surveillances de la nappe ont principalement mis en évidence une contamination de l'aquifère sous-jacent par des solvants chlorés.

Des travaux de dépollution sont toujours en cours ou ont déjà été réalisés sur certaines zones du site. Néanmoins, l'une des zones n'a pas fait l'objet d'une recherche précise et il existe un réel intérêt à localiser la zone source.

# 5.2 Description du site d'étude

# 5.2.1 Contexte général

Le site est situé sur les formations notée Fx sur la Figure 5.1 extrait de la carte géologique du BRGM. Cette formation d'une épaisseur de 8 m environ fait partie de quatre formations alluviales étagées bordant le cours d'eau au Nord et Ouest du site. Cette formation alluviale repose sur les sables du Cénomanien inférieur et moyen représentés par l'indice C2a sur la Figure 5.1 jusqu'à une profondeur de 30 m.

La nappe présente sur le site correspond à l'aquifère du Cénomanien, sa surface piezométrique est situé entre 8 et 10 m de profondeur par rapport au sol. La nappe a une épaisseur de 30 m de profondeur et son mur est formé par l'Argile glauconieuse du Cénomanien inférieur notée C1. Les sables du Cénomanien étant hétérogènes, des zones d'argile sableuses peuvent être retrouvées à certains endroits.

L'écoulement général de la nappe se fait du Nord-Est vers le Sud-Ouest en direction du cours d'eau, situé à environ 1.5 km du site d'étude. Ces eaux sont aussi exploitées pour un usage industriel en aval du site.



Figure 5.1 : Contexte générale du site d'étude.

### 5.2.2 Sensibilité du voisinage et zones polluées

En aval du site se trouve la zone industrielle qui peut être soumise à un risque majeur en cas de panache important. Le site d'étude comporte au total 4 zones contaminées comme le présente la Figure 5.2. La zone 1 située la plus au Nord est a priori dépolluée et ne présente plus de risques en limite Nord-Ouest du site. La zone 3 est en cours de dépollution, avec la présence d'un traitement type *Pump and treat* en limite Sud-Ouest de site (le pompage a commencé en 2008). La zone 4 s'apparente à une surface très réduite non traitée avec une source potentiellement localisée. Seule la zone 2 à ce jour n'a pas été étudiée avec une zone source non identifiée et semble présenter une pollution potentiellement située dans le bâtiment FF. Les travaux de localisation de source se concentreront donc sur la zone 2 du site d'étude. La Figure 5.2 présente les piézomètres situés au droit et autour de la zone 2. P11 a été échantillonné il y a quelques années mais est aujourd'hui inutilisable (piézomètre bouché).

### 5.2.3 Historique de site

#### Photos aériennes du site

La pollution se trouvant potentiellement au niveau du bâtiment FF de la zone 2, il est intéressant de pouvoir établir un historique de site, présenté par la figure 5.3. Ainsi, d'après les photos aériennes, les premiers bâtiments ont été construits vers la fin des années 50. Au fur et à mesure des années, le site s'est développé et la mise en place du bâtiment FF ne s'est faite qu'entre 1969 et 1972. L'origine de la pollution sur la zone 2 date probablement de ces 50 dernières années au maximum. A partir des années 2000, le site correspond à la répartition actuelle des différents bâtiments.



**Figure 5.2 :** Zones polluées du site et piézomètres présents autour et au droit de la zone 2 qui est la zone concernée. En rouge P11, piézomètre présent sur la zone 2 mais bouché et inutilisable.



**Figure 5.3 :** Historique du site d'étude. En vert, le bâtiment FF, délimitant la surface où la source peut être retrouvée.

#### Données historiques existantes

Des analyses semestrielles ont eu lieu sur site de janvier 2000 à avril 2017. L'historique des concentrations en solvants chlorés est disponible sur la Figure 5.4 sur la page suivante. Les sommes molaires en solvant chlorés en  $\mu$ mol.L<sup>-1</sup> sont représentées sur les 7 piézomètres localisés sur la Figure 5.2. A noter, que dans toute l'étude, nous prendrons en compte la somme molaire en solvants chlorés, car nous souhaitons localiser la source à partir d'un modèle de transport.

L'historique permet d'avoir un premier aperçu sur les contaminations potentielles au droit et autour de la zone 2. Il apparait que des fortes concentrations en solvants chlorés ont été mesurées sur P11, piézomètre le plus proche du bâtiment FF de 2000 à 2008 sans diminution notable. Aucune autre donnée n'est disponible sur ce piézomètre depuis fin 2008, dû à sa détérioration. D'un point de vue général, sur les autres piézomètres, les concentrations n'évoluent pas et restent assez constantes. Néanmoins, il est à noter que seul P23 situé en limite Ouest de site, connait une baisse significative de 2004 à 2017, probablement due à l'influence de la barrière hydraulique installée en 2008. Le piézomètre P3 situé au droit de la zone 4, connait une forte augmentation des concentrations dès l'année 2001 et sa concentration reste constante malgré la mise en place de la barrière hydraulique. P33, situé dans le bâtiment GG, lui aussi ne connait pas de diminution et ne semble pas être influencé par la barrière. D'un point de vue général et malgré le manque de données sur la zone 2, l'évolution des concentrations proche du bâtiment FF de 2000 à 2008 et suite à un entretien avec des personnes travaillant sur sites depuis plusieurs années, nous confirmons qu'il existe potentiellement une zone source dans le bâtiment FF.



101

# 5.3 Campagne de reconnaissance

La première campagne de reconnaissance s'est déroulée en juillet 2017. Elle avait pour but d'effectuer des mesures en contaminants au Préleveur Ciblé (PC) et des mesures de niveaux piézométriques. Les mesures de concentrations ont été réalisées sur P29, P32 et P23.

# 5.3.1 Mesures piézométriques

La campagne piézométrique a été réalisée sur 9 piézomètres autour et au droit de la zone 2. Les charges hydrauliques et l'esquisse de la piézométrie sont présentées sur la Figure 5.5. L'écoulement général se fait bien du Nord-Est vers le Sud-Ouest. Néanmoins, les isopièzes semblent mettre en valeur une légère influence de la barrière hydraulique installée sur la zone 3. Le pompage est réalisé à partir de trois points présents sur la ligne de la barrière hydraulique (Figure 5.5), pompant chacun un débit de 5 m<sup>3</sup>.h<sup>-1</sup>.



**Figure 5.5 :** Carte piézométrique approximative de la zone d'étude (lignes tracées à la main).

# 5.3.2 Mesures des concentrations

Les mesures sur site ont été faites à l'aide du préleveur ciblé (PC). Plusieurs profondeurs ont pu être échantillonnées avant de réaliser un pompage sur toute la colonne d'eau dans tous le piézomètre afin d'avoir une concentration moyenne. Seules P29, P32 et P23 ont pu être échantillonnés sur plusieurs profondeurs. Les résultats sont illustrés sur la Figure 5.6. Les concentrations sont exprimées en somme molaire de solvants chlorés car la stratégie de localisation de source développée se fait via un modèle de transport.



**Figure 5.6 :** Distribution verticale des concentrations en solvant chlorés sur les piézomètres P29, P32 et P23. Les barres représentent les valeurs moyennes suite au pompage de toute la colonne d'eau du piézomètre associé.

# 5.3.3 Synthèse et schéma conceptuel simplifié

Cette campagne de reconnaissance a permis d'avoir une première idée des concentrations présentes sur P29, P32 et P23. Ainsi, P29 est le piézomètre avec les concentrations en contaminants les plus élevées et il est le plus proche du bâtiment FF. Un panache allant de P29, P32 à P23 pourrait être dessiné, mais sans aucune certitude vu le faible nombre de points mesurés. Une distribution verticale relativement homogène des contaminants peut être notée avec néanmoins un léger pic de concentrations entre 12.50 et 13.50 m de profondeur par rapport à la surface (sur P29 et P32). P23 présente des valeurs homogènes sur toute la hauteur investiguée.

Le manque d'information notamment au droit de P11 est préjudiciable pour cette première analyse. En effet, les données historiques donnent des concentrations très élevées sur ce point mais à partir de 2008, aucune information n'est disponible. Le prélèvement sur P11 était prévu lors de cette campagne mais il a été retrouvé totalement bouché et inutilisable. Les données de cette première campagne de reconnaissance donnent un panache potentiel impactant les piézomètres P29, P32 jusqu'en limite de site sur P23. Le piézomètre P11 aurait permis d'enlever certaines incertitudes notamment pour la construction du schéma conceptuel. Afin d'illustrer ces incertitudes, un schéma conceptuel simplifié a été dessiné à partir des connaissances acquises sur le site, de l'historique du site et des données obtenues lors de cette campagne de reconnaissance.

Ce manque d'information a permis de focaliser la première phase de mesure sur la mise en place de nouveaux forages. La localisation des nouveaux points s'est faite en fonction des incertitudes liées à la zone 2 sans modélisation préalable vu le faible nombre de données disponibles. Les nouveaux piézomètres serviront à construire la Phase 1 de la modélisation, citée dans le Chapitre 4 afin de lancer l'analyse GMLA pour localiser la source.



**Figure 5.7 :** Schéma conceptuel simplifié de la zone d'étude suite à la campagne de reconnaissance.

# 5.4 PHASE 1 : Campagne de terrain et construction du modèle

### 5.4.1 Campagne de forage 1

La première campagne de forage a eu lieu en Mars 2018. L'emplacement a été choisi en fonction du panache supposé et du manque d'informations tout en voulant éviter de forer dans un bâtiment. Comme le montre la Figure 5.8, certaines extensions ou nouveaux bâtiments ne sont pas visibles sur le plan général du site (extension du bâtiment GG et mise en place d'une tente de stockage appelé bâtiment NN). Au total, 4 forages ont été créés durant cette campagne (F1, F2, F3 et F4). F1 et F3 sont respectivement situés proches du bâtiment GG et du bâtiment NN afin d'évaluer l'extension du panache potentiel venant du bâtiment FF. F2 est localisé très proche du piézomètre bouché P11 afin de combler le manque d'informations à ce niveau. Enfin, un dernier piézomètre nommé F4 a été placé en limite de site au sud de P23 pour évaluer l'aval du panache.



**Figure 5.8 :** Emplacement des nouveaux piézomètres F1, F2, F3 et F4. En bleu les piézomètres initialement présents, en vert les nouveaux forages.

Les piézomètres ont un diamètre intérieur de 80 mm et une crépine allant en moyenne de 8.00 m à 15.00 m de profondeur (massif filtrant dans l'espace annulaire à partir de 6 m de profondeur). La coupe de chacun des forages est présentée dans l'Annexe B. Ainsi la lithologie retrouvée sur les forages du haut vers le bas est composé :

- d'enrobé sur les 10 20 premiers cm sur F2 et F3;
- de remblais sablo-graveleux entre 0 et 1.50 m de profondeur,
- de sable roux à silex sur F1 et F2, parfois limoneux (sur F4) allant en moyenne de 1.50 à 3.00 m de profondeur;
- de sable grossier de couleur jaune entre 3.00 et 6.00 m sur F1 et F3 et seulement de 3.00 à 4.00 m sur F4. Pas de sable jaune sur F2,
- d'un important horizon de sable grossier marron orangé allant en moyenne de 6.00 à 13.00 m de profondeur pour les 4 piézomètres,
- d'un sable limoneux variable entre 12 et 14.50 m sur F2 et F3,
- d'une argile grise de 13.00 à 15.00 m sur F1, de 14.00 à 15.50 m sur F2 et de 18.00 à 20.00 m sur F3 (précédé par un horizon argilo-sableux grisâtre).

Les sables du Cénomanien caractérisant l'aquifère, correspondent au sable grossier marron orangé qui est majoritairement présent. Néanmoins, il existe d'une part des horizons plus ou moins limoneux à certains endroits et d'autre part une couche non négligeable d'argile grise retrouvée sur F1, F2 et F3 à des profondeurs variant de 13.00 à 18.00 m. Cette couche d'argile peut jouer un rôle sur le comportement du panache de polluant pouvant créer une zone d'accumulation de contaminants proche de la zone source, ceux-ci étant des polluants denses.

# 5.4.2 Mesures piézométriques Phase 1

La piézométrie a été réalisée sur 13 points autour de la zone 2. La Figure 5.9 est une esquisse approximative de la carte piézométrique tracée à la main afin d'avoir un aperçu des isopièzes potentiels.

# 5.4.3 Mesures des concentrations Phase 1

La campagne de prélèvements s'est déroulé en Mai 2018 sur F1, F2, F3, F4, P29, P32 et P23. Les analyses ont été réalisées à l'aide d'un GC-MS dont la colonne qui permet la séparation est une 624-SIL-MS (Restek, France). Les résultats des concentrations moyennes en solvants chlorés sont récapitulés sur le Tableau 5.1. Les distributions verticales des contaminants sont présentés en Annexe C.



**Figure 5.9 :** Carte piézométrique approximative de la zone d'étude suite à la campagne réalisée en mai 2018 (ligne tracée à la main).

	cDCE ( $\mu$ g.L <sup>-1</sup> )		TCE	$\mu$ g.L <sup>-1</sup> ) $\sum$ molaire ( $\mu$ mol.L <sup>-</sup>		laire ( $\mu mol.L^{-1}$ )
	Mars	Mai	Mars	Mai	Mars	Mai
P29	416	392	2302	1730	21.87	17.24
P32	4	39	515	292	3.96	2.65
P23	3	12	138	175	1.08	1.46
F1		19		243		2.05
F2		< 5		357		2.73
F3		< 5		396		3.00
F4		212		6628		52.8

**Tableau 5.1 :** Concentrations en solvants chlorés durant les campagnes de Marset Mai 2018. En vert, les campagnes de mai 2018 utilisées pour la modélisation.



**Figure 5.10 :** Concentrations en solvants chlorés exprimé en  $\mu$ mol.L<sup>-1</sup> (Somme molaire) lors de la campagne de mai 2018.

La Figure 5.10 donne un aperçu des concentrations obtenues sur la zone d'étude. Ainsi, la concentration la plus forte a été mesurée au droit de P29, piézomètre situé a priori dans la partie amont du panache. Les piézomètres F3, F2 et P32 semblent être situés en milieu de panache avec des valeurs assez homogènes. En limite de site, P23 donne une concentration inférieure aux piézomètres présents au droit de la zone 2. Des valeurs très élevées en solvants chlorés sont à noter sur F4 (notamment en TCE). De par sa localisation, il semble probable qu'une source située dans le bâtiment faisant face à F4 impacte ce piézomètre. F4 ne sera donc pas prise en compte pour la localisation de la source au niveau de la zone 2.

# 5.4.4 Schéma conceptuel affiné

Suite à la campagne de forage et de mesures réalisées en Mars et Mai 2018 cf. Annexe B et C), il a été possible d'affiner le schéma conceptuel (Figure 5.11), à l'aide des nouveaux piézomètres et de la prise en compte de l'horizon argileux situé entre 15 et 20 m de profondeur qui est potentiellement discontinu. Ainsi, deux hypothèses sont retenues avec une première où la couche d'argile empêche la descente complète du polluant et une deuxième hypothèse où une partie du panache descend du aux sables plus ou moins limoneux situés à 15 m. En termes de localisation, les résultats sur chaque piézomètre semblent indiquer que la source se trouve dans la partie Nord du bâtiment FF. La stratégie de localisation de source sera basée sur ces premières informations, présentées dans les sections suivantes.



**Figure 5.11 :** Schéma conceptuel affiné suite à la campagne de forage et prélèvement réalisé en Mars et Mai 2018.

# 5.4.5 Construction du modèle de base

La construction du modèle de base est réalisée à partir des connaissances disponibles sur le site et des données régionales. La stratégie de modélisation de localisation de source a été développée sur le Chapitre 4 à partir d'un modèle 2D, géométrie choisie pour ce cas réel.

Le domaine pris en compte a une extension en x de 980 m en y de 880 m, afin de pouvoir poser les conditions limites loin du panache. L'épaisseur de l'aquifère a été considéré de 24 m (cf. Schéma conceptuel sur la Figure 5.11).

#### Discrétisation spatiale

La discrétisation spatiale diffère en fonction de la zone concernée. Ainsi, la zone d'intérêt correspondant au bâtiment FF a une grille plus fine avec des mailles de  $5 \times 2$ . Le reste du modèle correspond à des mailles beaucoup plus grandes avec une dimension de  $20 \times 10$ . Cette différence permet d'optimiser le temps de calcul sans impacter les résultats des simulations. La grille est présentée sur la Figure 5.12. A noter que l'axe des x est orienté selon un angle de 75 degrés par rapport au Nord.



Figure 5.12 : Structure du modèle utilisé.

#### Discrétisation temporelle

Un suivi a été réalisé durant une année complète (de Juillet 2017 à Aout 2018) sur P29 afin d'estimer les variations temporelles de la piézométrie. Il apparait que le

niveau de la nappe n'est pas très dépendant des eaux météoriques lors d'épisodes pluvieux et ne suit pas les périodes basses eaux et hautes eaux (Figure 5.13). Dans ce cas de figure, le modèle d'écoulement est réalisé en régime permanent. Afin d'avoir un panache à l'équilibre du contaminant, une période de 1400 jours discrétisée par période de 100 jours a été choisie pour le modèle.



**Figure 5.13 :** Niveau piézométrique sur P29 de Juillet 2017 à Aout 2018. La légère augmentation à partir de 250 jours correspond au pic de précipitations au mois de Mars et au mois de Juin 2018 représenté par l'histogramme mais n'impacte pas grandement le niveau piézométrique.

#### Conditions limites

Les limites naturelles représentées par le cours d'eau (Figure 5.1) se trouvent à plus d'1 km du site et vu la taille du domaine, les conditions de potentiels imposés seront les bords du domaine respectant le gradient hydraulique naturel régional (Figure 5.12). Ainsi, pour la Phase 1, les limites de potentiels imposés dépendent des valeurs des piézomètres en limite de site avec au Nord-Est une valeur de 44.10 m et au Sud-Ouest une valeur de 42.20 m. Les autres axes en limite du domaine sont considérés comme limites de flux nuls.

#### Répartition des points pilotes

Afin de couvrir tout le domaine d'étude et d'avoir une représentation plus réaliste de l'hétérogénéité du milieux, 95 points pilotes ont été répartis régulièrement sur une grille relativement lâche hors de la zone d'intérêt et avec une densité plus élevée au niveau de la zone 2 comme le montre la Figure 5.14. L'interpolation utilisée est un krigeage (avec un variogramme de type sphérique et une portée égale à 100 m) a été choisi pour interpoler la conductivité hydraulique entre les points pilotes comme l'exemple des cas synthétiques traités dans le Chapitre 4.



**Figure 5.14 :** Répartition des points pilotes sur le domaine d'étude. En rouge, la ligne de variation de  $Y_s$  à un  $X_s$  fixe égal à 590 m.

#### Paramétrisation du GMLA

Le schéma de paramétrisation du GMLA pour la localisation de source est mis en place de la même façon que dans le Chapitre 4, incluant les conductivités hydrauliques représentées par les points pilotes, la coordonnée  $Y_s$  de la source (axe perpendiculaire au panache), et la dispersivité  $\alpha_L$ . La coordonnée  $X_s$  sera considérée comme fixe étant donné le peu d'informations disponibles dans le bâtiment et du faible impact de ce paramètre sur la localisation de la source.

Le Tableau 5.2 synthétise l'ensemble des paramètres utilisés pour la localisation de source au GMLA sur le site réel.

GROU	JPES DE PARAMÈTRES	Cas Réel
Kpp	Nombre	95
	Portée du variogramme	100
	min - max (m/jour)	0.5-450
	Transformation	log
	Type d'incrément	relatif
	Valeur de l'incrément	0.01
$\alpha L$	min - max (m)	0.5-10
	Transformation	log
	Type d'incrément	relatif
	Valeur de l'incrément	0.01
$Y_s$	min - max (m)	400-710
	Transformation	aucune
	Type d'incrément	absolu
	Valeur de l'incrément	1.00
GROU	UPES D'OBSERVATIONS INITIAUX (PHASE 1)	Cas Réel
Н	Nombre initial	12
	Transformation	Racine
C	Nombre	6
	Transformation	Racine

**Tableau 5.2 :** Paramètres initiaux utilisés dans l'optimisation GMLA pour chaquegroupe de paramètres et d'observations.

# 5.5 PHASE 1 : Analyse GMLA et DW

En accord avec l'étude des cas synthétiques, une première optimisation est réalisée avant chaque Phase (correspondant à l'Etape 0), utilisant seulement les H pour la calibration. Ensuite, les points pilotes estimés représentant le champ de K sont utilisés comme paramètres initiaux en plus de la source et de la dispersivité, pour l'Etape 1 (avec H et C).

# 5.5.1 Résultats de l'optimisation

L'optimisation a permis d'estimer une position de source à un  $Y_s = 642 \pm 14$  m et une dispersivité  $\alpha_L$  de 4.97  $\pm$  1.27 m. Le RMSE pour les H est de 0.06 m et pour les C de 1.2  $\mu$ mol.L<sup>-1</sup>. Les coefficients de variation sont a piori acceptables avec une valeur de 5% pour les données H et de 7.9% pour les données C. L'adéquation optimale (suite à plusieurs essais) entre les données observées et simulées est présentée sur la Figure 5.15. Le panache résultant de cette première phase est présenté sur la Figure 5.16.



Figure 5.15 : Adéquation entre données simulées et données observées lors de la Phase 1 sur le cas réel. En bleu les données H et en rouge les données C.

# 5.5.2 Analyse du Data worth

L'analyse du DW s'est faite à l'intérieur du cadre rouge représenté sur la Figure 5.16. Au total 8720 points (dans chaque cellule du cadre rouge) ont été ajoutés afin de créer la carte des incertitudes liées à  $Y_s$ . Tout comme les cas synthétiques, deux variogrammes directionnels ont été modélisés à partir du panache des concentrations simulé en Phase 1. Ces variogrammes ont permis d'évaluer une portée de 130 m dans la direction de l'axe des x et de 55 m dans la direction y (Figure 5.17). Ces variogrammes ont permis de tracer les ellipses autour de chaque nouveau point localisé sur la Figure 5.18. Soulignons que la direction majeure du variogramme évolue selon l'orientation x et y proche de la source.



**Figure 5.16 :** Panache potentiel simulé lors de la calibration de la Phase 1. Le cadre rouge correspond à la zone prise en compte pour l'analyse DW.



**Figure 5.17 :** Variogrammes directionnels de concentrations (en x et y) modélisés suite à la simulation du panache.



**Figure 5.18 :** Carte des incertitudes liées à Ys suite à la localisation de source de la Phase 1 sur le cas réel.

La carte obtenue est présentée sur la Figure 5.18. Le premier point positionné est le piézomètre F7, positionné sur la zone d'incertitude la plus forte. Ensuite, la surface avec le plus d'incertitudes hors de l'ellipse liée au point F7 correspond à la zone au Nord de ce même point. Néanmoins, le piézomètre P30 (qui n'a pas pu être pris en compte sur la première phase) est localisé sur cette zone d'incertitude et sera inclus dans la liste comme nouveau point. Le deuxième point représenté par F6 sur la Figure 5.18 a donc été choisi au sud de F7 là où les incertitudes sont les plus élevées. Du fait de la présence de bâtiments ou de zones de stockage entrainant une impossibilité de forer, le dernier point F5 a été placé à l'aval hydraulique du point idéal qui a été obtenu a l'aide de la carte des incertitudes. Cette analyse DW a permis d'établir un nouveau plan de forage pour la Phase 2.

# 5.6 PHASE 2 : Campagne de terrain

### 5.6.1 Campagne de forage 2

La deuxième campagne de forage s'est déroulée en Aout 2018, avec l'ajout des points précédemment déterminés F5, F6 et F7. Les piézomètres ont un diamètre intérieur de 80 mm et une crépine allant en moyenne de 8.00 à 15.00 m de profondeur. La coupe et les caractéristiques des piézomètres sont présentées en Annexe B. Les mêmes lithologies sont retrouvées sur l'ensemble des piézomètres avec la présence de la couche d'argile seulement sur F5 à environ 16 m de profondeur.

### 5.6.2 Prélèvements et analyses Phase 2

L'échantillonnage de la Phase 2 a été mené sur 10 piézomètres en Septembre 2018 (F1, F2, F3, F5, F6, F7, P30, P29, P32 et P23). Les résultats des concentrations moyennes en solvants chlorés sont présentés sur le Tableau 5.3. Les valeurs utilisées correspondent à celle mesurées un mois après foration. La Figure 5.20 met en avant la différences entre ces concentrations (suivant foration et un mois après). Les distributions verticales des concentrations ont été mesurées sur F1, F2, F3, F5, F6, F7, P29 et P32 et sont présentées dans l'Annexe D. La Figure 5.19 résume les concentrations obtenues sur la zone d'étude avec une concentration maximum retrouvée sur F7. Le point F6 ne semble pas impacté par le panache contrairement à F5 qui est plus impacté malgré sa position plus en aval.



Figure 5.19 : Concentrations en solvants chlorés exprimé en  $\mu$ mol.L<sup>-1</sup> (Somme molaire) lors de la Phase 2.

**Tableau 5.3 :** Concentrations en solvants chlorés durant les campagnes de Mai, Aout et Septembre 2018. En vert, les campagnes de septembre utilisées pour la modélisation.

	cDCE ( $\mu$ g.L <sup>-1</sup> )		TCE	$(\mu \mathbf{g.L})$	g.L <sup>-1</sup> ) $\sum mol$			laire ( $\mu$ mol.L <sup>-1</sup> )	
	Mai	Aout	Sept	Mai	Aout	Sept	Mai	Aout	$\operatorname{Sept}$
P29	392	111	351	1728	1550	870	17.24	12.98	10.26
P32	39	28	34.50	292	250	111	2.6	2.2	1.20
P30	-	21	15	-	899	883	-	7.08	6.90
P23	12	< 5	< 5	175	29	33	1.46	0.22	0.25
F1	18.9	14.46	< 5	243	92	82.58	2.05	0.85	0.63
F2	< 5	< 5	< 5	356	384	505	2.72	2.94	3.86
F3	< 5	< 5	10	395	374	152	3.02	2.86	1.26
F5	-	< 5	< 5	-	1433	1120	-	8.65	8.55
F6	-	< 5	< 5	-	150.3	132.76	-	1.15	1.01
F7	-	< 5	2201	-	57.65	144.74	-	7.67	23.80



**Figure 5.20 :** Comparaison des concentrations en solvants chlorés obtenues (en  $\mu$ mol.L<sup>-1</sup>) directement après foration et un mois après sur F1, F2, F3, F5, F6 et F7.

# 5.7 PHASE 2 : Analyse GMLA et DW

# 5.7.1 Résultats de l'optimisation

L'optimisation prenant en compte toutes les observations (15 pour les H et 10 pour les C), a permis d'estimer une source positionnée à un  $Y_s = 634 \pm 3.66$  m et une dispersivité  $\alpha_L$  de 5.14  $\pm$  1.09 m. Les RMSE des H et C sont respectivement de 0.08 m et de 2.5  $\mu$  mol.L<sup>-1</sup> (NRMSE - H = 5% et NRMSE - C = 11 %). L'adéquation entre données observées et simulées est présentée sur la Figure 5.21. Le panache simulé sur cette Phase 2 est visible sur la Figure 5.22.



Figure 5.21 : Adéquation entre données simulées et données observées lors de la Phase 2. En bleu les données H et en rouge les données C.

# 5.7.2 Carte du DW après ajout des nouveaux points

De la même manière que pour la Phase 1, la carte du DW a été calculée afin de voir l'influence de l'ajout des points sur l'incertitude liée à  $Y_s$ . La carte est présentée sur la Figure 5.23. Elle permet de constater une diminution des incertitudes à l'extérieur du bâtiment sur la localisation de la source par rapport à la Phase 1.



**Figure 5.22 :** Panache simulé lors de la calibration de la Phase 2. La source a été estimé à  $Y_s = 634$  m.



Figure 5.23 : Carte des incertitudes liées à  $Y_s$  après ajout des nouveaux forages.

# 5.8 PHASE 1/PHASE 2 : Discussions

# 5.8.1 Récapitulatif

Le Tableau 5.4 résume les résultats obtenus lors de la modélisation pour trouver la position de la source. D'après les résultats, la source semble potentiellement être située dans le bâtiment FF à un  $Y_s = 634$  m et une dispersivité estimée à 5.14 m (Figure 5.24). D'après la carte des incertitudes liées à  $Y_s$ , les zones de variances les plus fortes sont situées à l'intérieur du bâtiment. Les NRMSE obtenus peuvent être considérés comme acceptables mais du fait de la forme du panache, il est intéressant d'approfondir l'analyse par rapport au champ de K et des vitesses obtenus à partir de la Phase 2.

**Tableau 5.4 :** Récapitulatif des résultats sur la localisation de source sur site réel.Entre parenthèse les valeurs NRMSE.

	Phase 1	Phase 2
$Y_s$	$642 \pm 13.96$	$634 \pm 3.66$
$\alpha L$	$4.97 \pm 1.27$	$5.14 \pm 1.09$
RMSE (NRMSE)- H (m)	0.06~(5%)	0.08~(5%)
RMSE (NRMSE)- C ( $\mu$ mol.L <sup>-1</sup> )	1.2~(7.9%)	2.5~(11%)



**Figure 5.24 :** Distribution a posteriori des paramètres  $Y_s$  et  $\alpha_L$  lors de la Phase 1 et 2.

# 5.8.2 Analyse du champ de K et des vitesses de Darcy simulés

La Figure 5.25 montre le champ de K estimé par le GMLA suite à la dernière localisation de source. Ainsi, des zones de très faibles K apparaissent au bord du

bâtiment FF (proche de F2, F6, F7 et P30), ce qui entraine un resserrement des isopièzes, aidant le panache à tourner, comme le montre la Figure 5.22. Cette zone de faible K semble peu probable par rapport à la réalité du terrain car celle-ci n'est possible que si des fondations sont présentes à plus de 10 m de profondeur.



**Figure 5.25 :** Champ du log de K modélisé suite à la localisation de source en Phase 2.

De plus, sur la Figure 5.26, les vitesses mesurées au DVT sur le terrain ne montrent aucune adéquation avec les vitesses obtenues par le modèle. Ces informations complémentaires ont permis d'évaluer les origines des incertitudes rencontrées lors de la Phase 2 pour la localisation de source. Il apparait donc que le champ de K et les vitesses de Darcy obtenus par le modèle sont très éloignées de la réalité du terrain ce qui laisse à penser que le bâtiment FF présente potentiellement plusieurs sources. A la base, l'étude sur site réel a été menée de façon à suivre la même logique que la méthode développée dans le Chapitre 4 (une seule source et un seul type de contaminant). Néanmoins, dans ce cas d'étude, la mesure des flux massiques ainsi que la chimie doivent être utilisées pour améliorer le modèle conceptuel du site, ceci aidant à lancer de manière plus précise la Phase 3.



Figure 5.26 : Vitesse de Darcy mesurées au DVT en fonction des vitesses de Darcy simulées sur 8 piézomètres.

# 5.9 PHASE 3 : Amélioration du modèle conceptuel du site

### 5.9.1 Mesures indirectes de flux massiques (DVT+PC)

Durant les différentes campagnes, des mesures de concentrations en polluant et des vitesses de Darcy sur les piézomètres proches du bâtiment FF ont été réalisées. Ceci a permis d'évaluer les flux massiques passant par chaque piézomètre (Figure 5.27), donnant une information supplémentaire sur la dynamique du panache. Ainsi, contrairement à la carte des concentrations, le piézomètre P29 montre un flux massique plus important que F7 et des valeurs de flux fortes et proches pour F5 et F2. Il existe donc probablement deux zones de flux indépendantes avec une au Nord touchant F7 et P29 et une au Sud touchant F5 et F2.

### 5.9.2 Relation cis-DCE et TCE

L'information sur les deux zones de flux a priori indépendantes, a orienté notre réflexion sur l'analyse du rapport entre TCE et cDCE dans la zone 2. Les résultats sont présentés sur la Figure 5.28. En analysant plus précisément le rapport cDCE/TCE, la dernière campagne a permis de voir que les piézomètres ne sont pas impactés de la même manière. Sur la campagne datant du mois de septembre 2018, le piézomètre F7 montre une concentration en cDCE environ 20 fois supérieure à celle en TCE alors que dans les autres piézomètres, le TCE est majoritaire. A ce titre, l'analyse permet de décomposer la zone en deux panaches



**Figure 5.27 :** Flux massiques (somme molaire des solvants chlorés) indirectes calculés à partir du DVT et du prélèvement simple.

potentiels (avec F3 et F6 qui semblent situés entre les deux panaches):

- au sud, un panache composé essentiellement de TCE, impactant les piézomètres F2, F5 et F1,
- au nord un panache de TCE, dont une partie subit une forte dégradation créant un panache de cDCE impactant F7 principalement et P29.

# 5.9.3 Modèle à deux sources de contaminants

#### Paramètres initiaux

Afin d'évaluer les hypothèses proposées précédemment, une phase de localisation utilisant deux sources a été lancée en utilisant la méthode GMLA. En amont de l'optimisation, une calibration manuelle a été réalisée afin d'établir les paramètres a priori présentés sur le Tableau 5.5. Une première source a été placée à  $Y_{s1} = 620$  m avec une valeur initiale de source de 50  $\mu$ mol.L<sup>-1</sup> et une seconde source  $Y_{s2} = 522$  m avec une valeur initiale de source de 40  $\mu$ mol.L<sup>-1</sup>. La dispersivité longitudinale a été considérée comme connue avec une valeur de 5.14 m, estimée lors de l'analyse GMLA précédente. Les points pilotes ont été approximativement calibrés avant le lancement de l'Etape 0. Néanmoins, afin d'imposer l'existence de deux panaches distincts (8 des 95 points pilotes ont été fixés entrainant aucune variation possible lors de la calibration), ceci afin de créer des zones de faibles


**Figure 5.28 :** Répartition des concentrations en TCE et en cis DCE ( $\mu$ g.L<sup>-1</sup>) sur l'ensemble des piézomètres de la zone 2 lors de la campagne de septembre 2018.

perméabilité pour conduire à la présence de deux panaches (sinon le GMLA peut revenir à un seul panache).

**Tableau 5.5 :** Paramètres a priori utilisés pour le GMLA et la localisation de deux sources de contaminants (localisation des intervalles sur la Figure 5.29).

Paramètres	Valeurs a priori	Intervalle
$Y_{s1}$	620	590 - 660
$Y_{s2}$	522	500 - 580
Concentration de la source 1 ( $\mu$ mol.L <sup>-1</sup> )	50	10 - 100
Concentration de la source 2 ( $\mu$ mol.L <sup>-1</sup> )	40	10 - 100

#### Résultats de l'analyse GMLA

L'optimisation a permis d'estimer une source  $Y_{s1}$  à une coordonnée égale à 624 ± 8 m et d'une valeur de 72 µmol.L<sup>-1</sup> et une deuxième source  $Y_{s2}$  à une coordonnée égale à 533 ± 6 m et d'une valeur de 17 µmol.L<sup>-1</sup> (Figure 5.29). Les RMSE sont pour les données H de 0.08 m (NRMSE = 4.6%) et pour les données C de 1.9



Figure 5.30 : Adéquation entre données simulées et données observées lors de la Phase 3 sur le cas réel. En bleu les données H et en rouge les données C.

 $\mu$ mol.L<sup>-1</sup> (NRMSE = 8%). Les adéquations entre données observées et simulées sont présentées sur la Figure 5.30. Le NRMSE reste élevé car seulement 4 points sont présents sur chaque panache, ce qui rend difficile la calibration.



**Figure 5.29 :** Panaches simulés lors de la calibration Phase 3 afin de localiser deux sources. La position de la source 1 a été estimée à  $Y_{s1} = 624$  m et celle de la source 2 à  $Y_{s2} = 533$  m.

L'analyse plus précise des flux et du rapport cDCE/TCE a permis d'affiner le modèle conceptuel du site et de lancer une modélisation pour localiser deux sources. Les résultats obtenus donnent une source au Nord impactant les piézomètres F7, P29 et F3 et une source plus au Sud impactant F2, F5 et F1. L'analyse des deux sources a permis d'estimer un nouveau champ de K ne mettant pas en valeur de zones très faibles proche du bâtiment, nettement plus en accord avec les caractéristiques géologiques du site(Figure 5.31). De plus, les vitesses simulées correspondent plus au valeurs mesurées sur le terrain (les résultats sont présentés sur la synthèse générale dans le Chapitre 6).



**Figure 5.31 :** Champ du log de K (m/jour) modélisé suite à la localisation des deux sources en Phase 3.

## 5.9.4 Modèle de transport réactif de la source Nord de la zone 2

Le modèle est construit de la même façon que celui utilisé pour les différentes phase du GMLA. La présence de TCE et de cDCE (Figure 5.28) sur la partie Nord de la zone 2 a orienté l'étude vers la possibilité d'avoir une dégradation du TCE provenant de la source du Nord  $Y_{s1}$ . Pour cela, un modèle cinétique d'ordre 1 est utilisé pour modéliser la dégradation du TCE en présence d'une phase organique. La valeur a priori de la cinétique est de 0.1 jour<sup>-1</sup>. La concentration de départ en TCE correspond à la valeur estimée de  $Y_{s1}$  de 72 µmol.L<sup>-1</sup>. La calibration s'est faite manuellement en considérant un ratio cDCE/TCE sur F7 de 20.6 et sur P29 de 0.54 (Cf. données observées sur la Figure 5.28). Suite à plusieurs essais-erreurs, la calibration optimale présentée sur la figure montre un ratio cDCE/TCE de 19.3 sur F7 et de 0.51 sur P29, corrélant avec les ratio

observés (Tableau 5.6).

	Observé	Simulé	
F7	20.6	19.3	
P29	0.54	0.51	

**Tableau 5.6 :** Résultats de la calibration du ratio cDCE/TCE réalisé sur la partie nord de la zone 2.



**Figure 5.32 :** Panaches de TCE et cDCE simulés au Nord de la zone impactant les piézomètres F7 et P29.

#### 5.10 PHASE 4 : Mesures Geoprobe (MIP-HPT)

La campagne Geoprobe a été réalisée en Aout 2017, avant la mise en place de la stratégie de modélisation. En effet, au début de l'étude, la connaissance du site ainsi que l'étude de l'historique donnait comme information la présence potentielle d'une source proche du piézomètre P11 (aujourd'hui bouché). Etant limité économiquement, le transect au Geoprobe a été réalisé sur 150 m (10 points séparés de 15 m), principalement dans la partie Sud du bâtiment FF (prenant en compte l'ancien piézomètre P11). L'objectif était de comparer l'apport de cette campagne par rapport à la stratégie de localisation de source. La Geoprobe a été réalisée à l'aide du MIP-HPT, afin d'évaluer la présence de solvants chlorés en fonction de la profondeur et d'analyser les caractéristiques hydrogéologiques. Les résultats sont présentés sur la Figure 5.33. L'analyse a permis de mettre en évidence les points où les concentrations en polluant sont les plus élevées. Il apparait que le point G3 présente la plus forte réponse au MIP, décrivant de fortes concentrations à partir de 14 m de profondeur. Le point G3 est situé entre le piézomètre F6 et F2, correspondant probablement au centre du panache sud décrit précédemment (à un  $Y_{s2}$  égal à 534 m).



#### 5.11 Conclusion

La stratégie de localisation d'une source de contaminant a été testée sur un site réel afin d'évaluer sa fiabilité. En raison du peu d'informations disponibles et suite à la campagne de reconnaissance, l'étude s'est initialement basée sur une seule source potentiellement présente dans le bâtiment FF. Les sommes molaires des concentrations en solvants chlorés ont été utilisées en tant que valeurs observées pour la Phase 1 et la Phase 2 afin de respecter l'approche réalisée sur les cas synthétiques.

La mise en place de la stratégie itérative pour la localisation de source, a permis de cibler précisément les forages (F5, F6 et F7) à mettre en place pour diminuer les incertitudes sur la localisation de source. En plus des informations en contaminants, la totalité des forages réalisés a permis de confirmer la présence d'une couche argileuse à environ 15 m de profondeur, empêchant la descente complète du DNAPL au mur de l'aquifère (à 30 m de profondeur par rapport au sol). Les résultats de la Phase 2, ont permis d'estimer la position de la source à un  $Y_s = 634$  m, par rapport à la carte du modèle utilisé (Figure 5.22). En terme d'adéquation entre données observées et simulées (H et C), les résultats via l'optimisation sont acceptables (NRMSE- H = 5% et NRMSE- C = 11%) selon la norme ASTM. Néanmoins, il est important de confronter ces résultats avec la réalité du terrain. Ainsi, le champ de K estimé par la méthode a mis en valeur une zone très peu perméable au bord du bâtiment FF, inférieure aux valeurs mesurées réellement sur site, ne pouvant être représentée que par la présence de fondations à plus de 10 m de profondeurs. Or, il est peu probable que de telles fondations soient présentes sur site, ce qui a orienté l'analyse sur une meilleure définition du modèle conceptuel.

L'analyse des flux massiques indirectes (DVT + PC) et du ratio cDCE/TCEa permis d'émettre l'hypothèse de la présence de deux sources distinctes. D'après ces informations, il est possible que deux panaches caractérisent la zone 2 avec un au Nord impactant principalement F7 et P29, et un au Sud impactant F2 et F5. Une Phase 3 correspondant à l'analyse GMLA a ensuite été testée en utilisant deux sources, donnant comme résultats une source  $Y_{s1} = 623$  m au Nord et une source  $Y_{s2} = 532$  m au Sud (Figure 5.29). L'adéquation entre données observées et simulées donne des résultats légèrement meilleurs que ceux obtenus dans la Phase 2 avec une NRMSE- H = 4.6% et une NRMSE- C = 8%. Cette faible amélioration peut provenir du fait que la présence de deux panaches conduit à très peu d'observations pour chaque panache. Du fait de la présence de cDCE dans la partie Nord de la zone, un modèle de transport réactif a aussi été réalisé au niveau de la source  $Y_{s1}$  afin de calibrer le ratio entre cDCE et TCE. Pour cela, une zone impactée par une phase organique a été ajoutée, dégradant le TCE venant de  $Y_{s1}$  donnant un ratio cDCE/TCE de 19.3 (20.6 en observé) sur F7 et de 0.51 (0.54 en observé) sur P29.

La campagne Geoprobe correspondant à la Phase 4, a été initialement réalisée au début du projet de thèse. Du fait du peu d'informations disponible, il a été décidé d'établir un transect de 150 m dans la partie sud du bâtiment FF, proche de l'ancien piézomètre P11, qui historiquement montrait les plus fortes concentrations. Les mesures ont permis d'évaluer la présence de contaminants principalement sur le point G3, correspondant potentiellement aux flux massiques provenant de la source  $Y_{s2}$  estimée durant la Phase 3.

L'applicabilité de la méthode GMLA a montré certaines limites sur le site réel, notamment due à la présence de plusieurs sources inconnues et en présence d'une dégradation du TCE. Le Chapitre 6 suivant présente l'ensemble des résultats des travaux de thèse sur la localisation d'une source, les discussions ainsi que les perspectives pouvant répondre aux différentes limites rencontrées.

# Chapitre 6 Discussion générale et conclusion

#### 6.1 Synthèse des travaux réalisés sur la localisation de source

L'objectif majeur des travaux de thèse était de proposer une stratégie innovante pour la localisation d'une source de contaminants à partir (i) de mesures indirectes de flux massiques de contaminants à l'aide d'outils innovants (ii) et du développement d'une stratégie de modélisation inverse permettant de localiser la source de manière itérative avec une diminution des incertitudes sur la source grâce à l'ajout de nouvelles données, sur cas synthétique et applicable à un site réel.

L'ensemble des travaux réalisés au cours de la thèse ont permis :

- de comprendre, grâce à la bibliographie, l'importance de la mesure des flux massiques sur les sites pollués, caractérisant plus précisément un site et facilitant la localisation d'une source,
- de développer un outil innovant (DVT) pour la mesure des vitesses de Darcy directement dans un puits, qui, combiné à des mesures de concentrations, donne indirectement les flux massiques traversant le puits,
- de développer une stratégie de modélisation inverse sur deux cas synthétiques pour estimer la position  $Y_s$  de la source à partir de données observées, combinant l'utilisation du GMLA comme technique d'optimisation non linéaire et une analyse du *Data Worth* permettant de cibler de nouvelles observations diminuant les incertitudes sur  $Y_s$ ,
- d'appliquer cette stratégie de localisation de source à un site réel et d'estimer l'apport de la mesure des flux massiques affinant le modèle conceptuel du site,
- de comparer les résultats de localisation de la source sur le site réel à une campagne Geoprobe réalisée sur ce même site en amont des travaux de thèse.

Les résultats obtenus sur les différents objectifs permettront (i) pour le DVT, de mettre en place d'éventuelles améliorations sur la gamme de mesures de vitesses et sur son utilisation dans différents contextes, (ii) pour la stratégie de modélisation inverse, de servir de base afin de développer la méthode avec une analyse plus approfondie des solutions potentielles et avec beaucoup plus de contraintes, notamment sur des cas synthétiques beaucoup plus complexes et (iii) de proposer un guide stratégique de localisation de source applicable à un site réel, à tester sur différents contextes afin d'en déduire des indices de fiabilité.

#### 6.2 Discussions et perspectives

#### 6.2.1 Apport des mesures de flux massiques indirectes : point sur le DVT

La mesure indirecte des flux massiques a été réalisée à partir du Préleveur Ciblé (PC) et du DVT développé durant la thèse. Le DVT, outil permettant de mesurer la vitesse de Darcy, apporte une solution innovante pour les sites et sols pollués, de par sa mesure simple et ciblée, pouvant donner une distribution verticale des vitesses le long d'une crépine. En effet, les différents tests réalisés en laboratoire et sur site ont permis d'évaluer la fiabilité de l'outil et de connaitre ses limites. Les vitesses mesurées au DVT ont donné des résultats globalement corrects lors de la comparaison avec le PFM et le PC (déduites de K et du gradient hydraulique). L'apport de la combinaison du DVT et du PC mesurant les flux massiques améliore la compréhension d'un site contaminé et affine le modèle conceptuel, à l'exemple de l'étude sur le site réel dans le Chapitre 5.

En termes de perspective et comme cité en conclusion du Chapitre 3, les limites du DVT doivent être étudiées avec plus de précisions afin d'élargir sa gamme de mesure. Les points importants à approfondir dans le futur sont :

- les effets de la taille de la fenêtre réservoir jouant un rôle sur la valeur de la gamme de vitesse potentielle du DVT,
- l'emplacement optimal de la sortie de la fenêtre facilitant le mélange homogène dans le mélangeur passif,
- le type et la longueur du mélangeur passif permettant de réduire ou d'augmenter les pertes de charges et donc jouant sur la valeur du coefficient  $\beta$ ,
- la mise en place d'un système pour connaitre précisément la direction des écoulements à l'échelle du piézomètre,
- l'utilisation d'une solution différente de la solution saline pour éviter les potentiels effets densitaires,
- la construction de tailles différentes de DVT adaptables à tous diamètres de piézomètre.

De plus, plusieurs contextes de site doivent être évalués (i) en milieu fracturé, (ii) en milieu à faible conductivité hydraulique (iii) ou en contexte extrême avec des valeurs de pH très acides ou basiques. Pour ce dernier, l'utilisation d'un autre type de matériau pour la base du DVT peut être une solution (actuellement le corps du DVT est en PVC). Pour ce qui est du contexte en milieu fracturé ou à faible conductivité, la solution se trouve dans l'élargissement de la gamme de mesure du DVT.

#### 6.2.2 Stratégie itérative pour la localisation d'une source sur cas synthétiques : ajout de contraintes supplémentaires

La stratégie de localisation d'une source a été développée initialement sur deux cas synthétiques A et B, en 2D, avec un champ de K hétérogène inconnu et une source considérée comme permanente. Pour cela, la méthode GMLA ainsi qu'une analyse du Data Worth ont été utilisés. Les essais ont permis d'appliquer la méthode sur un cas simple et un cas plus complexe pour évaluer la capacité à retrouver la source et à calibrer les charges hydrauliques et les concentrations. L'approche de type itérative avec l'ajout limité de nouvelles données a été mise en place afin de contraindre l'analyse et d'être applicable à un cas réel.

Les résultats obtenus donnent une bonne estimation de la coordonnée  $Y_s$  de la source, de la dispersivité longitudinale, avec des NRMSE acceptables pour chaque cas étudié et une diminution des incertitudes liées à la coordonnée  $Y_s$  de la source. De plus, l'analyse des sensibilités des paramètres par rapport aux observations a permis d'évaluer l'impact de l'ajout des nouvelles observations sur le paramètre  $Y_s$ , beaucoup plus sensible sur les dernières phases. Concernant les champs de K estimés, les résultats ne donnent pas exactement la représentation réelle du champ de K utilisé pour la construction du cas synthétique, mais reproduisent les zones de fortes et de faibles conductivités hydrauliques principales.

Certains points ou essais importants n'ont pas été abordés et pourraient faire l'objet d'améliorations ou de perspectives pour contraindre l'analyse avec :

- l'utilisation d'un nombre plus faible d'observations au départ, 6 au lieu de 10 observations,
- la localisation de deux ou plusieurs sources (approche qui a été abordée sur le cas réel dans la Phase 3),
- l'estimation de la valeur de concentration à la source (approche aussi abordée sur le cas réel dans la Phase 3),
- la localisation simultanée de  $Y_s$  et de  $X_s$  malgré le faible impact de ce dernier paramètre sur la dynamique du panache,
- la localisation d'une source en  $Y_z$  sur un modèle 3D hétérogène,
- la prise en compte de phénomènes transitoires (recharge ou pompage ponctuel),
- la localisation d'une source en transport réactif avec prise en compte de la chimie.

L'ensemble des tests présentés dans le Chapitre 4, ont permis d'établir une méthodologie afin de localiser une source de contaminants. Néanmoins, il est difficile de juger de la qualité des résultats et il apparait qu'une multitude de solutions peut exister, notamment pour le cas A, présentant un milieu assez homogène comparé au cas B. Afin de pouvoir définir l'applicabilité de la méthode de localisation de sources sur cas réel, il serait intéressant d'établir un critère pouvant mieux juger de cette qualité.

De ce fait plusieurs essais ont été réalisés afin de calibrer les C et H, en considérant la position  $Y_s$  de la source connue et en laissant varier les points pilotes du champs de K et la dispersivité  $\alpha_L$ . Pour chaque cas, une optimisation a été réalisée, sur chacune des 13 positions de source différentes, variant tous les deux mètres dans l'intervalle maximum, de 11 à 39 pour le cas A et de 25 à 69 pour le cas B. Les différentes phases de chaque cas ont été testées. Les RMSE de Cet H ont pu ensuite être calculés, afin d'analyser plus précisément les solutions obtenues par le GMLA aux environs de la solution idéale. Les résultats sont présentés sur les deux premières lignes de la Figure 6.1.

D'un point de vue général, il apparait que pour les premières phases, avant ajout des observations, l'optimisation permet d'obtenir une RMSE minimale pour une large gamme de  $Y_s$  (cas A : RMSE-C < 0.05 mg.L<sup>-1</sup> et RMSE-H < 0.01 m, cas B : RMSE-C < 0.3 mg.L<sup>-1</sup> et RMSE-H < 0.3 m). Pour le cas A, sur la Phase 1 (prise en compte de 10 observations), les  $Y_s$  donnant de bons résultats varient entre 17 et 37 m (pour C et H). L'ajout des observations à la Phase 2 (prise en compte de 13 observations) a permis de réduire cet intervalle variant de 27 à 35 m (pour rappel le  $Y_s$  réel est situé à 29 m). Idem pour le cas B, en Phase 1, les  $Y_s$  donnant des bons RMSE sont compris dans un large intervalle, de 35 à 67 m (10 observations). En Phase 3, l'intervalle est beaucoup plus réduit, allant de 59 à 67 m (valeur réelle égale à 61 m). L'ensemble des résultats est résumé sur la Figure 6.2.

De plus, ces différents essais ont aussi permis d'évaluer les champs de conductivités hydrauliques estimés pour chaque  $Y_s$  fixe. La Figure 6.1 présente dans la dernière ligne l'écart type des valeurs des points pilotes du champ de K estimé en fonction des  $Y_s$  imposés lors de la dernière phase d'optimisation (Phase 2 pour A et Phase 3 pour B). On remarque ainsi que les valeurs d'écart-type minimales de chaque cas sont associés au  $Y_s$  compris dans l'intervalle discuté précédemment mais aussi correspondant aux résultats finaux présentés dans le Chapitre 4. Pour le cas A, la valeur minimale de l'écart-type des points pilotes est associée à un  $Y_s = 31$  m, ce qui correspond à la valeur estimée de 30.7 m lors du test de la stratégie sur le cas A. De même pour le cas B, la valeur minimale de l'écart-type en Phase 3 est associée à un  $Y_s = 65$  m, proche de la valeur estimée dans le Chapitre 4 qui est de 64.51 m. Il semble donc que la solution se trouve lorsque le niveau d'hétérogénéité est le plus faible parmi tous les milieux estimés.



**Figure 6.1 :** Ensemble des graphiques représentant les RMSE des concentrations C et charges hydrauliques H en fonction des  $Y_s$  imposés ainsi que les écart-types des points pilotes des champs de K associés aux  $Y_s$  imposés.

Cet apport d'informations et d'analyses semble essentiel pour la caractérisation et la fiabilité des résultats trouvés sur l'étude des cas synthétiques. La méthodologie de départ développée est intéressante mais elle doit être accompagnée d'une étude plus précise prenant en compte deux nouveaux critères avec (i) une analyse GMLA des intervalles de  $Y_s$  correspondant au RMSE les plus faibles et (ii) une analyse de l'hétérogénéité du champ de K la plus faible, estimée lors de la dernière phase. L'ensemble de la méthode doit être validée sur un certain nombre de cas et de niveaux d'hétérogénéités différents afin de confirmer son efficacité et son applicabilité.



**Figure 6.2 :** Représentation des intervalles de  $Y_s$  donnant les meilleurs RMSE pour chaque phase et chaque cas.

## 6.2.3 Applicabilité de la stratégie de localisation d'une source sur site réel

L'application de la stratégie de localisation de source a été confrontée à un cas réel. Ainsi, les contraintes rencontrées sur site ont donné la possibilité d'approfondir la méthode mise en place sur des cas synthétiques. En effet, les résultats obtenus lors de la Phase 2 du cas réel ont permis de localiser une source, cependant le modèle présentait un champ de K ne pouvant pas correspondre à la réalité et donnait des vitesses de Darcy simulées trop éloignées de celle mesurées au DVT. Suite à une analyse plus précise des flux massiques mesurés au DVT+PC et au ratio cDCE/TCE, une Phase 3 a été exécutée, prenant en compte deux sources potentielles. Les positions des deux sources ont pu être estimées par le GMLA créant deux panaches distincts au Nord, composé de cDCE/TCE et au Sud panache de TCE seulement. Les vitesses simulées correspondant à cette estimation de deux sources potentielles, sont présentées sur la Figure 6.3, et montrent des valeurs plus proches de celles mesurées que pour l'hypothèse de la présence d'un seul panache. Le panache Nord composé de cDCE et TCE, a de même été calibré afin d'estimer la dégradation du TCE. Les deux panaches identifiés semblent situés à la même profondeur. Les mesures au préleveur ciblé ont principalement mis en évidence des concentrations plus élevées entre 12 et 14 m de profondeur, traduisant certainement une position des zones sources audessus du premier niveau de limon.



Vitesses de Darcy mesurées au DVT (cm/jour)

**Figure 6.3 :** Vitesses de Darcy simulées en Phase 2 et 3 du site réel en fonction des vitesses de Darcy mesurée au DVT.

Cette stratégie de localisation de source a été comparée en Phase 4 à une campagne de Geoprobe utilisant le MIP-HPT afin de juger la fiabilité de la méthode. En fonction du site, si celui-ci présente de fortes hétérogénéités, la localisation de plusieurs sources à partir du Geoprobe demande une densité importante de points entrainant un fort investissement économique. Dans la stratégie mise en place sur le site réel, le Geoprobe a plutôt été perçu comme un atout pour la validation des hypothèses, qui a permis dans notre cas de confirmer la présence d'une source dans la partie Sud du bâtiment. D'un point de vue général, la combinaison de la méthode de localisation et d'une approche ciblée de Geoprobe peut être une solution intéressante pour localiser les sources et ainsi avoir les informations supplémentaires pour optimiser la gestion et le traitement du site.

Si l'on compare l'analyse réalisée sur les cas synthétiques avec l'analyse faite sur le site réel, plusieurs critères non abordés dans le corps du mémoire doivent être pris en compte pour augmenter la fiabilité des résultats avec :

- une amélioration de la compréhension de la dynamique du site à l'aide de mesures de flux, de vitesses et de ratio chimiques (cDCE/TCE) afin de pouvoir identifier une présence potentielle de plusieurs sources,
- $\bullet\,$  une analyse de l'adéquation du champ de K estimé et juger si il existe des anomalies,
- une recherche de l'intervalle des  $Y_s$  correspondant d'une part aux RMSE les plus faibles,
- $\bullet$  une recherche du  $Y_s$  correspondant au niveau d'hétérogénéité minimal estimé.

Suite à l'analyse des cas synthétiques et du cas réel, la stratégie générale adoptée peut être présentée de manière schématique sur la Figure 6.4. Le logigramme proposé permet d'appréhender les différentes incertitudes et de pouvoir évaluer la qualité des résultats obtenus. Des incertitudes persistent néanmoins sur l'évaluation des résultats (optimaux ou non optimaux). L'application de la méthode sur plusieurs sites donnerait un retour d'expérience affinant le logigramme au fur et à mesure, permettant d'établir des indices de fiabilité sur la ou les sources présentes.

Au début du logigramme présenté sur la Figure 6.4, 6 piézomètres minimum sont requis pour l'étude. Le nombre de piézomètres choisis est basé sur l'étude de site réalisée pour la thèse. En effet, il n'existe pas de règle précise sur un nombre minimal de piézomètres, dépendant fortement du contexte du site. Néanmoins, d'après le rapport sur la Surveillance de la qualité des eaux souterraines appliquée aux ICPE et sites pollués datant de mai 2018 (INERIS et BRGM), il est conseillé de mettre en place 6 à 8 piézomètres si la pollution est détectée et n'a qu'une seule direction. En contexte de roche fracturée, un nombre plus important de piézomètres est conseillé.

A partir des premiers piézomètres les Phases 1 et 2 peuvent être lancées afin de cibler les futurs zones pour l'implantation de 3 nouveaux piézomètres et de localiser potentiellement une source de contaminants. Les résultats doivent faire l'objet d'une analyse approfondie (i) premièrement du critère RMSE (ou NRMSE) permettant d'évaluer la calibration entre données observées et simulées (acceptable ou non), (ii) deuxièmement de l'analyse du champ de K estimé afin de voir si celui-ci ne présente pas d'anomalies par rapport à la connaissance du site, (iii) et troisièmement d'une étude précise des flux massiques sur chaque piézomètre et du rapport des contaminants afin de localiser des zones de flux ou de panache différents. Cette analyse approfondie permet d'affiner le modèle conceptuel du site et de limiter le nombre d'hypothèses sur les potentielles sources présentes.



Figure 6.4 : Logigramme pour la localisation de source.

#### 6.3 Conclusion générale

L'objectif de la thèse était de définir une stratégie innovante de localisation d'une source à partir de mesures in situ et d'une modélisation inverse. Le travail bibliographique a défini tout d'abord l'importance de la mesure des flux massiques pour la caractérisation d'un site et établi un état de l'art sur la modélisation inverse pour la localisation d'une source.

Dans le sens des mesures in situ, le développement du DVT, fait l'objet aujourd'hui d'une publication au *Journal of Hydrology* (Essouayed et al., 2018). Combiné au Préleveur Ciblé (PC), le DVT propose une solution indirecte pour mesurer des flux massiques in situ avec un résultat quasi-instantané, contrairement à la majorité des outils existants. Seul le temps de mesures en laboratoire est nécessaire pour obtenir les concentrations en polluants. Des améliorations sont à prévoir afin de rendre le DVT adaptable à tout type de contexte. Aujourd'hui l'outil propose une gamme de mesure convenable pour la grande majorité des nappes. Cependant, plusieurs points doivent être prise en compte notamment la mesure des directions d'écoulement et l'influence de la taille de la fenêtre réservoir.

Concernant la modélisation inverse, la méthode GMLA associée à l'analyse Data Worth a été utilisée pour localiser les différentes sources sur chacun des cas synthétiques. L'ajout de nouvelles observations intégrées dans la stratégie est un apport essentiel pour cette localisation. Le développement de cette méthode répond aux limites des techniques de modélisations existantes qui généralement considèrent des paramètres connus et peu adaptables à des problématiques réelles. Malgré les bons résultats obtenus dans le Chapitre 4, la difficulté a été d'ajouter une analyse supplémentaire sur des critères jugeant mieux la qualité des résultats. Ces critères serviront de base à la suite des recherches et devront être confirmés pour différents types d'hétérogénéités.

Cette méthode a ensuite été appliquée dans un contexte réel. Initialement développée sur des cas synthétiques, l'approche a révélé les contraintes pouvant intervenir sur site. En effet, le nombre limité de piézomètres, les zones de forations non accessibles, la présence de plusieurs sources ou de différents polluants, sont des points qui n'ont pas été abordés dans le développement. L'apport des mesures indirectes de flux massiques (DVT+PC) avec la stratégie mise en œuvre, a amélioré la caractérisation de la zone polluée et affiné l'analyse sur la localisation des sources. Ainsi, l'étude demande une analyse complète de tous les paramètres intervenant dans la dynamique d'un site.

Les travaux de thèse ont permis d'apporter une partie de réponse en proposant une stratégie intéressante pour minimiser les incertitudes sur la position de la source et pour aider à cibler plus précisément une dépollution potentielle. Les résultats servirons à tester la stratégie sur d'autres types de sites améliorant au fur et à mesure la méthode illustrée par le logigramme.

### Références

- Adamson, D. T., Chapman, S., Mahler, N., Newell, C., Parker, B., Pitkin, S., Rossi, M., et Singletary, M. Membrane interface probe protocol for contaminants in low-permeability zones. *Groundwater*, 52(4):550–565, 2014. ISSN 17456584. doi: 10.1111/gwat.12085.
- Annable, M. D., Hatfield, K., Cho, J., Klammler, H., Parker, B. L., Cherry, J. A., et Rao, P. S. C. Field-scale evaluation of the passive flux meter for simultaneous measurement of groundwater and contaminant fluxes. *Environmental science* & technology, 39(18):7194–7201, sep 2005. doi: 10.1021/es050074g.
- Aral, M. M., Guan, J., et Maslia, M. L. Identification of contaminant source location and release history in aquifers. *Journal of hydrologic engineering*, 6 (3):225–234, 2001.
- Ayvaz, M. T. A hybrid simulation-optimization approach for solving the areal groundwater pollution source identification problems. *Journal of Hydrology*, 538:161–176, 2016.
- Bagtzoglou, A. et Atmadja, J. Mathematical methods for hydrologic inversion: The case of pollution source identification. *Water pollution*, pages 65–96, 2005.
- Bagtzoglou, A. C., Dougherty, D. E., et Tompson, A. F. B. Application of particle methods to reliable identification of groundwater pollution sources. *Water Resources Management*, 6(1):15–23, 1992.
- Ballard, S. The In Situ Permeable Flow Sensor: A Ground-Water Flow Velocity Meter. *Ground Water*, 34(2):231–240, 1996.
- Bashi-Azghadi, S. N., Kerachian, R., Bazargan-Lari, M. R., et Nikoo, M. R. Pollution source identification in groundwater systems: Application of regret theory and Bayesian networks. *Iranian Journal of Science and Technology -Transactions of Civil Engineering*, 40(3):241–249, 2016. ISSN 22286160. doi: 10.1007/s40996-016-0022-3.
- Basu, N. B., Rao, P. S., Poyer, I. C., Annable, M. D., et Hatfield, K. Fluxbased assessment at a manufacturing site contaminated with trichloroethylene. *Journal of Contaminant Hydrology*, 86(1-2):105–127, 2006. ISSN 01697722. doi: 10.1016/j.jconhyd.2006.02.011.

- Basu, N. B., Rao, P. S. C., Falta, R. W., Annable, M. D., Jawitz, J. W., et Hatfield, K. Temporal evolution of DNAPL source and contaminant flux distribution: Impacts of source mass depletion. *Journal of Contaminant Hydrology*, 95 (3):93–109, 2008. ISSN 01697722. doi: 10.1016/j.jconhyd.2007.08.001.
- Basu, N. B., Suresh, P., Rao, C., Poyer, I. C., Nandy, S., Mallavarapu, M., Naidu, R., Davis, G. B., Patterson, B. M., Annable, M. D., Others, Hatfield, K., et Others. Integration of traditional and innovative characterization techniques for flux-based assessment of Dense Non-aqueous Phase Liquid (DNAPL) sites. *Journal of Contaminant Hydrology*, 105(3):161–172, 2009. ISSN 01697722. doi: 10.1016/j.jconhyd.2008.12.005.
- Béland-Pelletier, C., Fraser, M., Barker, J., et Ptak, T. Estimating contaminant mass discharge: A field comparison of the multilevel point measurement and the integral pumping investigation approaches and their uncertainties. *Journal* of Contaminant Hydrology, 122(1-4):63-75, mar 2011. ISSN 0169-7722. doi: 10.1016/J.JCONHYD.2010.11.004. URL https://www.sciencedirect.com/ science/article/pii/S0169772210001452.
- Bockelmann, A., Ptak, T., et Teutsch, G. An analytical quantification of mass fluxes and natural attenuation rate constants at a former gasworks site. *Journal of Contaminant Hydrology*, 53(3):429–453, 2001. ISSN 01697722. doi: 10.1016/S0169-7722(01)00177-2.
- Borden, R. C., Daniel, R. A., LeBrun, L. E., et Davis, C. W. Intrinsic biodegradation of MTBE and BTEX in a gasoline-contaminated aquifer. *Water Resources Research*, 33(5):1105–1115, 1997. ISSN 00431397. doi: 10.1029/97WR00014. URL http://doi.wiley.com/10.1029/97WR00014.
- Brooks, M. C., Wood, A. L., Annable, M. D., Hatfield, K., Cho, J., Holbert, C., Rao, P. S. C., Enfield, C. G., Lynch, K., et Smith, R. E. Changes in contaminant mass discharge from DNAPL source mass depletion: Evaluation at two field sites. *Journal of Contaminant Hydrology*, 102(1-2):140–153, 2008a. ISSN 01697722. doi: 10.1016/j.jconhyd.2008.05.008.
- Brooks, M. C., Wood, A. L., Annable, M. D., Hatfield, K., Cho, J., Holbert, C., Rao, P. S. C., Enfield, C. G., Lynch, K., et Smith, R. E. Changes in contaminant mass discharge from DNAPL source mass depletion: Evaluation at two field sites. *Journal of Contaminant Hydrology*, 102(1-2):140–153, 2008b. ISSN 01697722. doi: 10.1016/j.jconhyd.2008.05.008.
- Brooks, M. C., Wood, A. L., Cho, J., Williams, C. A. P., Brandon, W., et Annable, M. D. Source strength functions from long-term monitoring data and spatially distributed mass discharge measurements. *Journal of Contaminant Hydrology*, sep 2018. ISSN 01697722. doi: 10.1016/j.jconhyd.2018.09.003. URL https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0169772218301578.

- Brouyère, S., Batlle-Aguilar, J., Goderniaux, P., et Dassargues, A. A new tracer technique for monitoring groundwater fluxes: The Finite Volume Point Dilution Method. *Journal of Contaminant Hydrology*, 95(3-4):121-140, jan 2008. ISSN 0169-7722. doi: 10.1016/J.JCONHYD.2007.09.001. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169772207001064.
- Butera, I., Tanda, M. G., et Zanini, A. Simultaneous identification of the pollutant release history and the source location in groundwater by means of a geostatistical approach. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 27(5):1269–1280, 2013.
- Cai, Z., Wilson, R. D., Cardiff, M. A., et Kitanidis, P. K. Increasing Confidence in Mass Discharge Estimates Using Geostatistical Methods. *Ground Water*, 49(2): 197–208, mar 2011. ISSN 0017467X. doi: 10.1111/j.1745-6584.2010.00709.x. URL http://doi.wiley.com/10.1111/j.1745-6584.2010.00709.x.
- Campbell, T. J., Hatfield, K., Klammler, H., Annable, M. D., et Rao, P. S. C. Magnitude and directional measures of water and Cr (VI) fluxes by passive flux meter. *Environmental science & technology*, 40(20):6392–6397, 2006. ISSN 0013936X. doi: 10.1021/es060268b.
- Cao, G., Qin, R., Wu, Y., Wu, J., Xu, Z., et Zhang, C. Effects of source size, monitoring distance and aquifer heterogeneity on contaminant mass discharge and plume spread uncertainty. *Environmental Fluid Mechanics*, 18(2):465–486, 2018. ISSN 1567-7419. doi: 10.1007/s10652-017-9564-6. URL http://link.springer.com/10.1007/s10652-017-9564-6.
- Chen, X., Brooks, M. C., et Wood, A. L. The uncertainty of mass discharge measurements using pumping methods under simplified conditions. *Journal of contaminant hydrology*, 156:16-26, jan 2014. ISSN 18736009. doi: 10.1016/j.jconhyd.2013.09.006. URL https: //linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0169772213001460http: //dx.doi.org/10.1016/j.jconhyd.2013.09.006.
- Cho, J., Annable, M. D., Jawitz, J. W., et Hatfield, K. Passive flux meter measurement of water and nutrient flux in saturated porous media: benchscale laboratory tests. *Journal of environmental quality*, 36(5):1266–1272, 2007. ISSN 0047-2425. doi: 10.2134/jeq2006.0370. URL http://www.ncbi.nlm. nih.gov/pubmed/17636287.
- Cupola, F., Tanda, M. G., et Zanini, A. Laboratory sandbox validation of pollutant source location methods. *Stochastic environmental research and risk* assessment, 29(1):169–182, 2015.
- Datta, B., Chakrabarty, D., et Dhar, A. Simultaneous identification of unknown groundwater pollution sources and estimation of aquifer parameters. *Journal of Hydrology*, 376(1):48–57, 2009.

- Dausman, A. M., Doherty, J., Langevin, C. D., et Sukop, M. C. Quantifying data worth toward reducing predictive uncertainty. *Ground Water*, 48(5):729–740, 2010. ISSN 0017467X. doi: 10.1111/j.1745-6584.2010.00679.x.
- Devlin, J. F., Tsoflias, G., McGlashan, M., et Schillig, P. An inexpensive multilevel array of sensors for direct ground water velocity measurement. *Ground-water Monitoring & Remediation*, 29(2):73–77, 2009.
- Doherty, W. N. Methodologies and software for PEST-based model predictive uncertainty analysis. *Watermark Numerical Computing*, 2010.
- Drost, W., Klotz, D., Koch, A., Moser, H., Neumaier, F., et Rauert, W. Point dilution methods of investigating ground water flow by means of radioisotopes. *Water Resources Research*, 4(1):125–146, 1968.
- Einarson, M. D. et Mackay, D. M. Peer Reviewed: Predicting Impacts of Groundwater Contamination. *Environmental Science & Technology*, 35(3): 66A-73A, feb 2001. ISSN 0013-936X. doi: 10.1021/es0122647. URL http: //pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/es0122647.
- Essouayed, E., Annable, M., Momtbrun, M., et Atteia, O. An innovative tool for groundwater velocity measurement compared with other tools in laboratory and field tests. *Journal of Hydrology X*, page 100008, dec 2018. ISSN 2589-9155. doi: 10.1016/J.HYDROA.2018.100008. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2589915518300087.
- Falta, R. W., Rao, P. S., et Basu, N. Assessing the impacts of partial mass depletion in DNAPL source zones: I. Analytical modeling of source strength functions and plume response. *Journal of Contaminant Hydrology*, 78(4):259– 280, 2005.
- Fraser, M., Barker, J., Butler, B., Blaine, F., Joseph, S., et Cooke, C. Natural attenuation of a plume from an emplaced coal tar creosote source over 14 years. *Journal of Contaminant Hydrology*, 100(3-4):101–115, sep 2008. ISSN 0169-7722. doi: 10.1016/J.JCONHYD.2008.06.001. URL https://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0169772208000867.
- Freeze, R. A. et Cherry, J. A. Groundwater. Technical report, 1979.
- Freeze, R. A., James, B., Massmann, J., Sperling, T., et Smith, L. Hydrogeological decision analysis: 4. The concept of data worth and its use in the development of site investigation strategies. *Ground Water*, 30(4):574–588, 1992.
- Gates, J. S. et Kisiel, C. C. Worth of additional data to a digital computer model of a groundwater basin. *Water Resources Research*, 10(5):1031–1038, 1974.
- Gelhar, L. W. Stochastic subsurface hydrology. page 390, 1993. URL http: //agris.fao.org/agris-search/search.do?recordID=US9520324.

- Gelhar, L. W., Welty, C., et Rehfeldt, K. R. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers. *Water Resources Research*, 28(7):1955–1974, jul 1992. ISSN 00431397. doi: 10.1029/92WR00607. URL http://doi.wiley.com/10. 1029/92WR00607.
- Goltz, M. N., Close, M. E., Yoon, H., Huang, J., Flintoft, M. J., Kim, S., et Enfield, C. Validation of two innovative methods to measure contaminant mass flux in groundwater. *Journal of contaminant hydrology*, 106(1):51–61, 2009. ISSN 01697722. doi: 10.1016/j.jconhyd.2009.01.001.
- Gorelick, S. M., Evans, B., et Remson, I. Identifying sources of groundwater pollution: an optimization approach. *Water Resour. Res*, 19(3):779–790, 1983.
- Guilbeault, M. A., Parker, B. L., et Cherry, J. A. Mass and Flux Distributions from DNAPL. *Ground Water*, 43(1):70–86, 2005. ISSN <null>.
- Gutierrez, A., Klinka, T., Thiéry, D., Buscarlet, E., Binet, S., Jozja, N., Défarge, C., Leclerc, B., Fécamp, C., Ahumada, Y., et Elsass, J. TRAC, a collaborative computer tool for tracer-test interpretation. *EPJ Web of Conferences*, 50: 3002, 2013. ISSN 2100-014X. doi: 10.1051/epjconf/20135003002. URL http://www.epj-conferences.org/10.1051/epjconf/20135003002.
- Gzyl, G., Zanini, A., Fraczek, R., et Kura, K. Contaminant source and release history identification in groundwater: a multi-step approach. *Journal of contaminant hydrology*, 157:59–72, 2014. ISSN 18736009. doi: 10.1016/j.jconhyd. 2013.11.006.
- Hatfield, Κ. Demonstration and validation of fractured rock  $\mathbf{a}$ passive flux meter. (April):1–179, 2015.URL https://www. serdp-estcp.org/Program-Areas/Environmental-Restoration/ Contaminated-Groundwater/Persistent-Contamination/ER-200831.
- Hatfield, K., Annable, M., Cho, J., Rao, P. S. C., et Klammler, H. A direct passive method for measuring water and contaminant fluxes in porous media. *Journal of Contaminant Hydrology*, 75(3):155–181, 2004.
- Hill, M. C., Faunt, C. C., Belcher, W. R., Sweetkind, D. S., Tiedeman, C. R., et Kavetski, D. Knowledge, transparency, and refutability in groundwater models, an example from the Death Valley regional groundwater flow system. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 64Hill, Ma:105–116, jan 2013. ISSN 1474-7065. doi: 10.1016/J.PCE.2013.03.006. URL https://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S1474706513000247.
- Huntley, D. et Beckett, G. D. Persistence of LNAPL sources: relationship between risk reduction and LNAPL recovery. *Journal of Contaminant Hydrology*, 59 (1):3–26, 2002. ISSN 01697722. doi: 10.1016/S0169-7722(02)00073-6.
- ITRC, I. T. &. R. C. Use and measurement of mass flux and mass discharge, 2010.

- James, B. R. et Freeze, R. A. The worth of data in predicting aquitard continuity in hydrogeological design. *Water Resources Research*, 29(7):2049–2065, 1993. ISSN 19447973. doi: 10.1029/93WR00547.
- James, B. R. et Gorelick, S. M. in Aquifer Remediation Design. 30(12):3499–3513, 1994.
- Jamin, P., Goderniaux, P., Bour, O., Le Borgne, T., Englert, A., Longuevergne, L., et Brouyère, S. Contribution of the finite volume point dilution method for measurement of groundwater fluxes in a fractured aquifer. *Journal of Contaminant Hydrology*, 182:244–255, nov 2015. ISSN 0169-7722. doi: 10.1016/J.JCONHYD.2015.09.002. URL https://www.sciencedirect.com/ science/article/pii/S0169772215300255.
- Jarsjo, J., Bayer-Raich, M., et Ptak, T. Monitoring groundwater contamination and delineating source zones at industrial sites: Uncertainty analyses using integral pumping tests. *Journal of Contaminant Hydrology*, 79 (3-4):107-134, oct 2005. ISSN 0169-7722. doi: 10.1016/J.JCONHYD. 2005.05.011. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/S0169772205000859?via{%}3Dihub.
- Kao, C. M. et Wang, Y. S. Field investigation of the natural attenuation and intrinsic biodegradation rates at an underground storage tank site. *Environmental Geology*, 40(4-5):622-631, 2001. ISSN 0943-0105. doi: 10.1007/ s002540000226. URL http://link.springer.com/10.1007/s002540000226.
- Kao, C. et Wang, C. Control of BTEX migration by intrinsic bioremediation at a gasoline spill site. Water Research, 34(13):3413-3423, sep 2000. ISSN 0043-1354. doi: 10.1016/S0043-1354(00)00070-1. URL https://www. sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0043135400000701.
- Kearl, P. M. Observations of particle movement in a monitoring well using the colloidal borescope. *Journal of Hydrology*, 200(1):323–344, 1997. ISSN 00221694. doi: 10.1016/S0022-1694(97)00026-7.
- Kearl, P. M., Korte, N. E., et Cronk, T. A. Suggested modifications to ground water sampling procedures based on observations from the colloidal borescope. *Groundwater Monitoring & Remediation*, 12(2):155–161, 1992.
- Kearl, P. M., Roemer, K., Rogoff, E. B., et Renn, R. M. Characterization of a fractured aquifer using the colloidal borescope. *Advances in Environmental Research*, 3(1):49–57, 1999.
- Kerfoot, W. B. et Massard, V. A. Monitoring well screen influences on direct flowmeter measurements. *Groundwater Monitoring & Remediation*, 5(4):74– 77, 1985.

- King, M. W., Barker, J. F., Devlin, J. F., et Butler, B. J. Migration and natural fate of a coal tar creosote plume: 2. Mass balance and biodegradation indicators. *Journal of Contaminant Hydrology*, 39(3-4):281-307, oct 1999. ISSN 0169-7722. doi: 10.1016/S0169-7722(99)00048-0. URL https: //www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169772299000480.
- Klammler, H., Hatfield, K., et Annable, M. D. Concepts for measuring horizontal groundwater flow directions using the passive flux meter. Advances in water resources, 30(4):984–997, 2007.
- Klammler, H., Hatfield, K., Guimarães da Luz, J. A., Annable, M. D., Newman, M., Cho, J., Peacock, A., Stucker, V., Ranville, J., Cabaniss, S. A., et Rao, P. S. C. Contaminant discharge and uncertainty estimates from passive flux meter measurements. *Water Resources Research*, 48(2), 2012. ISSN 00431397. doi: 10. 1029/2011WR010535. URL http://doi.wiley.com/10.1029/2011WR010535.
- Korte, N., Kearl, P. M., Siegrist, R. L., Muck, M. T., Schlosser, R. M., et Others. An evaluation of horizontal recirculation using single-well tests, pumping tests, tracer tests, and the colloidal borescope. *Ground Water Monitoring and Remediation*, 20(1):78–85, 2000.
- Kübert, M. et Finkel, M. Contaminant mass discharge estimation in groundwater based on multi-level point measurements: A numerical evaluation of expected errors. *Journal of Contaminant Hydrology*, 84(1-2):55–80, 2006. ISSN 01697722. doi: 10.1016/j.jconhyd.2005.12.003.
- Labaky, W., Devlin, J. F., et Gillham, R. W. Probe for measuring groundwater velocity at the centimeter scale. *Environmental science & technology*, 41(24): 8453–8458, 2007.
- Labaky, W., Devlin, J. F., et Gillham, R. W. Field comparison of the point velocity probe with other groundwater velocity measurement methods. *Water Resources Research*, 45(4), 2009.
- Lamontagne, S., Dighton, J., et Ullman, W. Estimation of groundwater velocity in riparian zones using point dilution tests. *CSIRO Land and Water*, 2002.
- Lemière, B., Seguin, J. J., Le Guern, C., Guyonnet, D., Baranger, P., Saada, A., Darmendrail, D., Conil, P., Bodénan, F., Fauconnier, D., et Others. Guide sur le comportement des polluants dans les sols et les nappes. Orléans: Editions du BRGM, 2001.
- Li, K. B. et Abriola, L. M. A multistage multicriteria spatial sampling strategy for estimating contaminant mass discharge and its uncertainty. *Water Resources Research*, 45(6), 2009. ISSN 00431397. doi: 10.1029/2008WR007362. URL http://doi.wiley.com/10.1029/2008WR007362.

- Li, K. B., Goovaerts, P., et Abriola, L. M. A geostatistical approach for quantification of contaminant mass discharge uncertainty using multilevel sampler measurements. *Water Resources Research*, 43(6), 2007. ISSN 00431397. doi: 10. 1029/2006WR005427. URL http://doi.wiley.com/10.1029/2006WR005427.
- Maddock, T. Management model as a tool for studying the worth of data. *Water Resources Research*, 9(2):270–280, 1973.
- Mahar, P. S. et Datta, B. Identification of pollution sources in transient groundwater systems. *Water Resources Management*, 14(3):209–227, 2000.
- Mahar, P. S. et Datta, B. Optimal monitoring network and ground-waterpollution source identification. *Journal of water resources planning and management*, 123(4):199–207, 1997.
- Mahar, P. S. et Datta, B. Optimal identification of ground-water pollution sources and parameter estimation. Journal of Water Resources Planning and Management, 127(1):20–29, 2001.
- Marsily, G. *De l'identification des systèmes hydrologiques*. PhD thesis, Universite Pierre et Marie Curie, 1978.
- McAndrews, B., Heinze, K., et DiGuiseppi, W. Defining TCE Plume Source Areas Using the Membrane Interface Probe (MIP). Soil and Sediment Contamination: An International Journal, 12(6):799–813, nov 2003. ISSN 1532-0383. doi: 10. 1080/714037716. URL https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/ 714037716.
- McCall, W., Christy, T. M., Pipp, D., Terkelsen, M., Christensen, A., Weber, K., et Engelsen, P. Field Application of the Combined Membrane-Interface Probe and Hydraulic Profiling Tool (MiHpt). *Groundwater Monitoring & Remediation*, 34(2):85–95, 2014. ISSN 17456592. doi: 10.1111/gwmr.12051.
- McCall, W., Christy, T. M., et Evald, M. K. Applying the HPT-GWS for Hydrostratigraphy, Water Quality and Aquifer Recharge Investigations. *Ground-water Monitoring & Remediation*, 37(1):78–91, 2017. ISSN 17456592. doi: 10.1111/gwmr.12193.
- Meyer, J. R., Parker, B. L., et Cherry, J. A. Characteristics of high resolution hydraulic head profiles and vertical gradients in fractured sedimentary rocks. *Journal of Hydrology*, 517:493–507, 2014.
- Meyer, J. R., Parker, B. L., Arnaud, E., et Runkel, A. C. Combining High Resolution Vertical Gradients and Sequence Stratigraphy to Delineate Hydrogeologic Units for a Contaminated Sedimentary Rock Aquifer System. *Journal* of Hydrology, 2016.

- Michalak, A. M. et Kitanidis, P. K. Estimation of historical groundwater contaminant distribution using the adjoint state method applied to geostatistical inverse modeling. *Water Resources Research*, 40(8):1–14, 2004a. ISSN 00431397. doi: 10.1029/2004WR003214.
- Michalak, A. M. et Kitanidis, P. K. Estimation of historical groundwater contaminant distribution using the adjoint state method applied to geostatistical inverse modeling. *Water Resources Research*, 40(8):1–14, 2004b. ISSN 00431397. doi: 10.1029/2004WR003214.
- Middlemis, H., Merrick, N. P., Ross, J. B., et Rozlapa, K. L. Groundwater modelling guidelines for Australia: an overview. In *Proceedings, MODSIM* 2001 International Congress on Modelling and Simulation, Canberra, Australia, 2001.
- Momii, K., Jinno, K., et Hirano, F. Laboratory studies on a new laser Doppler velocimeter system for horizontal groundwater velocity measurements in a borehole. Water Resources Research, 29(2):283–291, 1993.
- Moore, C., Wöhling, T., et Doherty, J. Efficient regularization and uncertainty analysis using a global optimization methodology. *Water Resources Research*, 46(8), 2010.
- Neupauer, R. M. et Wilson, J. L. Backward probability model using multiple observations of contamination to identify groundwater contamination sources at the Massachusetts Military Reservation. *Water Resources Research*, 41(2), 2005.
- Neupauer, R. M. et Wilson, J. L. Adjoint method for obtaining backward-in-time location and travel time probabilities of a conservative groundwater contaminant. Water Resources Research, 35(11):3389–3398, 1999. ISSN 00431397. doi: 10.1029/1999WR900190.
- Newell, C. J., Conner, J. A., et Rowen, D. L. Groundwater remediation strategies tool. Prepared for American Petroleum Institute, Regulatory Analysis and Scientific Affairs Department, Publication, (4730), 2003.
- Newell, C. J., Farhat, S. K., Adamson, D. T., et Looney, B. B. Contaminant Plume Classification System Based on Mass Discharge. *Ground Water*, 49(6): 914-919, nov 2011. ISSN 0017467X. doi: 10.1111/j.1745-6584.2010.00793.x. URL http://doi.wiley.com/10.1111/j.1745-6584.2010.00793.x.
- Osorno, T. C., Devlin, J., et Firdous, R. An In-Well Point Velocity Probe for the rapid determination of groundwater velocity at the centimeter-scale. *Journal of Hydrology*, 557:539–546, feb 2018. ISSN 00221694. doi: 10.1016/ j.jhydrol.2017.12.033. URL https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/ pii/S002216941730851X.

- Palmer, C. D. Borehole dilution tests in the vicinity of an extraction well. Journal of Hydrology, 146(C):245–266, 1993. ISSN 00221694. doi: 10.1016/ 0022-1694(93)90279-I.
- Panday, S., Langevin, C. D., Niswonger, R. G., Ibaraki, M., et Hughes, J. D. MODFLOW-USG version 1: An unstructured grid version of MODFLOW for simulating groundwater flow and tightly coupled processes using a control volume finite-difference formulation. Technical report, 2013. URL https: //pubs.er.usgs.gov/publication/tm6A45.
- Piccinini, L., Fabbri, P., et Pola, M. Point dilution tests to calculate groundwater velocity: an example in a porous aquifer in northeast Italy. *Hydrological Sciences Journal*, 61(8):1512–1523, 2016.
- Pitrak, M., Mares, S., et Kobr, M. A simple borehole dilution technique in measuring horizontal ground water flow. *Ground Water*, 45(1):89–92, 2007.
- Ptak, T., Schwarz, R., Holder, T., et Teutsch, G. Ein neues integrales Verfahren zur Quantifizierung der Grundwasserimmission, Teil II: Numerische Lösung und Anwendung in Eppelheim. *Grundwasser*, 5(4):176–183, dec 2000. ISSN 1430-483X. doi: 10.1007/s767-000-8369-4. URL http://link.springer.com/ 10.1007/s767-000-8369-4.
- Risk, N. Impacts of DNAPL Source Treatment : Experimental and Modeling Assessment of the Benefits of Partial DNAPL Source Removal. (September), 2009.
- Rønde, V., McKnight, U., Sonne, A., Balbarini, N., Devlin, J., et Bjerg, P. Contaminant mass discharge to streams: Comparing direct groundwater velocity measurements and multi-level groundwater sampling with an in-stream approach. *Journal of Contaminant Hydrology*, 206: 43-54, nov 2017. ISSN 0169-7722. doi: 10.1016/J.JCONHYD.2017. 09.010. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169772217302073?via{%}3Dihub.
- Schwede, R. L. et Cirpka, O. A. Stochastic evaluation of mass discharge from pointlike concentration measurements. *Journal of Contaminant Hydrology*, 111(1-4):36-47, jan 2010. ISSN 0169-7722. doi: 10.1016/J. JCONHYD.2009.10.011. URL https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S0169772209001545.
- Semprini, L., Kitanidis, P. K., Kampbell, D. H., et Wilson, J. T. Anaerobic Transformation of Chlorinated Aliphatic Hydrocarbons in a Sand Aquifer Based on Spatial Chemical Distributions. *Water Resources Research*, 31(4): 1051-1062, apr 1995. ISSN 00431397. doi: 10.1029/94WR02380. URL http://doi.wiley.com/10.1029/94WR02380.

- SERDP. Mass Flux and Mass Discharge : Uses and Measurement MEASURE-MENT AND USE OF MASS. 2010.
- Singh, R. M., Datta, B., et Jain, A. Identification of unknown groundwater pollution sources using artificial neural networks. *Journal of water resources planning and management*, 130(6):506–514, 2004.
- Snodgrass, M. F. et Kitanidis, P. K. A geostatistical approach to contaminant source identification. *Water Resources Research*, 33(4):537–546, 1997.
- Strack, O. D. L. et Haitjema, H. M. Modeling double aquifer flow using a comprehensive potential and distributed singularities: 1. Solution for homogeneous permeability. *Water Resources Research*, 17(5):1551–1560, 1981. ISSN 1944-7973. doi: 10.1029/WR017i005p01551. URL http://dx.doi.org/10.1029/ WR017i005p01551.
- Stroo, H. F., Unger, M., Ward, C. H., Kavanaugh, M. C., Vogel, C., Leeson, A., Marqusee, J. A., et Smith, B. P. Peer reviewed: Remediating chlorinated solvent source zones, 2003.
- Sun, A. Y., Painter, S. L., et Wittmeyer, G. W. A robust approach for iterative contaminant source location and release history recovery. *Journal of contaminant hydrology*, 88(3):181–196, 2006.
- Tink Environmental et EPA. South Eastern EDWARDSTOWN Stage 4B (MIP). Technical report, 2017.
- Troldborg, M., Nowak, W., Tuxen, N., Bjerg, P. L., Helmig, R., et Binning, P. J. Uncertainty evaluation of mass discharge estimates from a contaminated site using a fully Bayesian framework. *Water Resources Research*, 46(12), 2010. ISSN 00431397. doi: 10.1029/2010WR009227. URL http://doi.wiley.com/ 10.1029/2010WR009227.
- Tucciarelli, T. et Pinder, G. Optimal data acquisition strategy for the development of a transport model for groundwater remediation. *Water Resources Research*, 27(4):577–588, 1991. ISSN 19447973 00431397. doi: 10.1029/ 90WR02397.
- Verardo, E. Procédés de traitement biologiques in situ: la modélisation numérique comme outil d'aide à la décision. PhD thesis, Université Michel de Montaigne-Bordeaux III, 2016.
- Vilhelmsen, T. N. et Ferré, T. Extending Data Worth Analyses to Select Multiple Observations Targeting Multiple Forecasts. *Groundwater*, 2017.
- Wagner, B. J. Simultaneous parameter estimation and contaminant source characterization for coupled groundwater flow and contaminant transport modelling. *Journal of Hydrology*, 135(1-4):275–303, jul 1992. ISSN 0022-1694.

doi: 10.1016/0022-1694(92)90092-A. URL https://www.sciencedirect. com/science/article/pii/002216949290092A.

- Wallis, I., Moore, C., Post, V., Wolf, L., Martens, E., et Prommer, H. Using predictive uncertainty analysis to optimise tracer test design and data acquisition. *Journal of hydrology*, 515:191–204, 2014.
- Welter, D. E., White, J. T., Hunt, R. J., et Doherty, J. E. Approaches in highly parameterized inversion—PEST++ Version 3, a Parameter ESTimation and uncertainty analysis software suite optimized for large environmental models. Technical report, 2015. URL https://pubs.er.usgs.gov/publication/tm7C12.
- White, J. T., Fienen, M. N., et Doherty, J. E. A python framework for environmental model uncertainty analysis. *Environmental Modelling & Software*, 85: 217-228, nov 2016. ISSN 13648152. doi: 10.1016/j.envsoft.2016.08.017. URL http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1364815216305461.
- Wöhling, T., Geiges, A., et Nowak, W. Optimal Design of Multitype Groundwater Monitoring Networks Using Easily Accessible Tools. *Groundwater*, 54(6):861– 870, nov 2016. ISSN 0017467X. doi: 10.1111/gwat.12430. URL http://doi. wiley.com/10.1111/gwat.12430.
- Xu, T. et Gómez-Hernández, J. J. Joint identification of contaminant source location, initial release time, and initial solute concentration in an aquifer via ensemble Kalman filtering. Water Resources Research, 52(8):6587–6595, 2016.
- Xu, T. et Gómez-Hernández, J. J. Simultaneous identification of a contaminant source and hydraulic conductivity via the restart normal-score ensemble Kalman filter. *Advances in Water Resources*, 112:106–123, 2018.
- Yeh, H.-D., Chang, T.-H., et Lin, Y.-C. Groundwater contaminant source identification by a hybrid heuristic approach. Water Resources Research, 43(9), 2007.
- Yeh, H.-D., Lin, C.-C., et Yang, B.-J. Applying hybrid heuristic approach to identify contaminant source information in transient groundwater flow systems. *Mathematical Problems in Engineering*, 2014, 2014.
## ANNEXE A

# Paramétrisation du modèle pour le calcul du coefficient $\beta$ du DVT



Figure A.1 : Vue du dessus de la discrétisation du modèle (distances en m)



**Figure A.2 :** Vue approchée de la discrétisation du modèle aux abords du puits en présence du DVT



**Figure A.3 :** Discrétisation en z du modèle représentant les 15 cm de la fenêtre réservoir

## ANNEXE B

Coupes et caractéristiques des forages réalisés lors de la thèse sur le site d'étude

F7	Repère sol	Côte (mNGF) 52.73	LAMBERT CC48	X Y	1489931.33 7201279.79	Dalle béton	o o o Remblaic	0 0 0 0			Sable	IImoneux orange				Sable grossier			Sable limoneux	orange					
F6	Repère sol	Côte (mNGF) 52.74	LAMBERT CC48	×	1489951.82 7201243.21	Enrobé –	e e e Remblaic			Sable	limoneux orange		1 1 1	Sable arrossier	marron				limoneux	orange					
£Ξ.	Repère sol	Côte (mNGF) 53.24 0	LAMBERT CC48	×	1489912.74 7201149.01	Enrobé Seeseration	<ul> <li>Remblais</li> <li>Remblais</li> </ul>	Sable roux	à silex		Sable	grossier	Jaune	Ashla arocciar	marron orangé			Sable .	limoneux orange				Argile grise		
F4	Repère sol	Côte (mNGF) 52.68	LAMBERT CC48	×	1489664.55 7201046.48	- 0 - 0 - 0	e e Remblais	limon sahlariy rorry		able grossier iaune					Sable	grossier marron	orangé								
Ξ	Repère sol	Côte (mNGF) 52.76	LAMBERT CC48	×	1489860.98 7201174.66	Enrobé -	e e e Remblais		Sable	grossier	Jaure			Sable	grossier	orangé					Sable	orange	Argile sableuse		Arglie grise
F2	Repère sol	Côte (mNGF) 52.93	LAMBERT CC48	×	1489965.09 7201161.59	Enrobé	Remblais	Sable roux	à silex					Sable arossier	marron orandé						Sable limoneux orange	Argile grise			
F1	Repère sol	Côte (mNGF) 53.31	LAMBERT CC48	Х Ү	1489862.23 7201072.63		o o sablo - graveleux	Sable roux	à silex		able grossier	jaune				bable grossier	marron orangé			-					
						° °	-	2	, ,	1 1	4	5	<mark>ا</mark> و	- <sup>2</sup>		6	10	1	12 –	13	4	15	16	· ר -	20 –

#### B. COUPES ET CARACTÉRISTIQUES DES FORAGES RÉALISÉS LORS DE LA THÈSE SUR LE SITE D'ÉTUDE

## ANNEXE C

Distribution verticale des concentrations en solvants chlorés sur F1, F2, F3, P29, P32 et P23 lors de la campagne de mai 2018



## ANNEXE D

Distribution verticale des concentrations en solvants chlorés sur F1, F2, F3, F5, F6, F7, P29 et P32 lors de la campagne de septembre 2018

