3.2 Modèles en hydrogéologie

Bear en 1993 avait simplifié les objectifs d'une modélisation hydrogéologique en trois éléments :

— mieux comprendre le fonctionnement du système ;
— fournir des informations nécessaires à la mise en oeuvre d'un dispositif de mesures (pompages, traçages, etc.) ;
— réaliser des prédictions sur le comportement du système considéré en réponse à des sollicitations.

L'utilité des modèles pour la gestion quantitative des ressources en eau découle de leur capacité de simulation (Viessman, 1989). La simulation concerne donc le calcul de la réponse d'un hydrosystème à une série d'évènements (variables de forçages, variables de décision ou perturbations), pendant un intervalle de temps préalablement établi. La gestion du système S comprend 3 actions : prévoir, agir et contrôler. Les décisions, comme les lâchers de barrages, les restrictions (action agir) sont prises en comparant les sorties d'intérêts y et les indicateurs d'état des ressources en eau. De la même manière, l'utilisation du modèle doit comparer des sorties objectifs à des mesures afin d'évaluer si le

Table 3.2 – Eléments à prévoir dans la gestion des ressources en eau (Christin, 2008)

Eaux superficielles	**Eaux souterraines**
Volumes ruisselés en hautes/basses eaux pour différents intervales de temps	Nature des aquifères
Débit de pointe	Transmissivités des aquifères
Débit d'étiage	Date de tarissement des sources
Niveaux dans les barrages et les réserves collinaires	Piézométrie minimale et maximale
Temps de transfert entre les aménagements et les points de consignes de débit	
Nature des relations nappes-rivières	
Influences des pompages sur les eaux superficielles/souterraines	

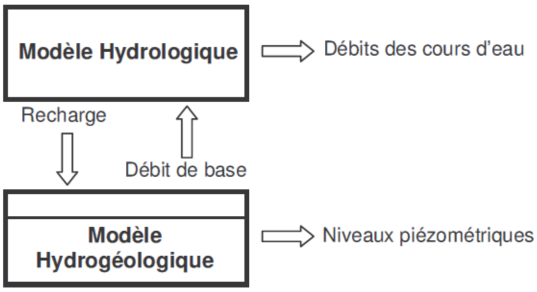

Figure 3.4 – Schématisation du modèle couplé eaux superficielles-eaux souterraines (Barthel, 2006)

modèle est assimilable au système. Pour que le modèle M puisse être utilisé afin de gérer le système S, le critère e_S, différence entre les sorties modélisée y_m et mesurée y, doit être minimisée. Dans l'affirmative, les gestionnaires peuvent, à partir du modèle M, évaluer divers scénarios et prendre des décisions sur les actions à entreprendre sur l'hydrosystème souterrain. L'avantage le plus important du modèle est de pouvoir simuler des variables qui ne sont pas mesurées sur le système.

Des informations explicites concernant les piézométries des nappes constituent des indicateurs de l'état des ressources en eau souterraine. Le gestionnaire disposerait alors d'informations importantes pour prévoir le sens échanges nappes-rivières et les réserves encore disponibles dans les aquifères (Tableau 3.2). Les modèles hydrologiques sont destinés à répondre aux problèmes de gestion eaux superficielles (débits) et les modèles hydrogéologiques sont destinés aux problèmes de gestion des aquifères (niveaux piézométriques). Pour obtenir ces deux informations, il faut donc utiliser des modèles couplés qui intègrent explicitement la totalité des processus liés aux eaux souterraines et superficielles : SHE, MODCOU, NEWSAM.

En effet, le modèle hydrologique permet de déterminer la variable de sortie correspondant à la recharge de l'aquifère, qui, au pas de temps suivant, sera une variable d'entrée dans le modèle hydrogéologique (figure 3.4). Ce dernier calculera alors les niveaux piézométriques dans les nappes et le débit de base, qui sera la contribution de la nappe aux débits des cours d'eau. Ce débit de base, qui peut être positif ou négatif en fonction du sens d'échange nappes-rivières, s'ajoute aux ruissellements superficiels calculés par le modèle hydrologique afin de définir les débits à l'exutoire du bassin versant.

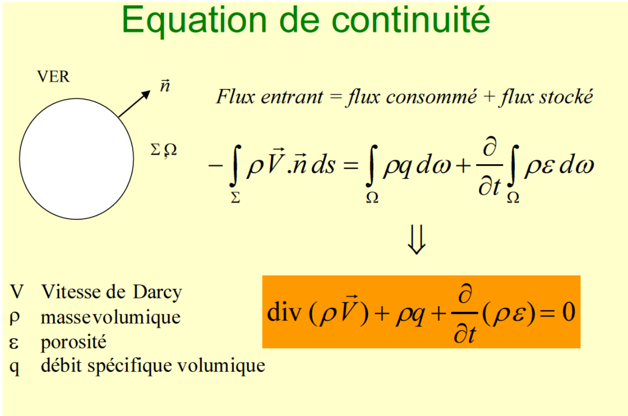

FIGURE 3.5 – Représentation de l'équation de continuité (Ledoux, 2009)

3.2.1 Equation de diffusivité à deux dimensions

L'absence de variations significatives de la charge (côte piézométrique) le long de la verticale au sein d'un aquifère permet de ramener à deux le nombre de variables dans l'espace dont dépend h. Les relations phénoménologiques mettent en oeuvre les variables macroscopiques qui définissent le milieu et le comportement de l'eau qui sature les pores. Trois types de relations sont dégagées (Ledoux, 2003) :

- **Equation de continuité** : elle traduit la conservation de la masse de fluide à l'intérieur de tout Volume Elémentaire Représentatif (VER). Elle s'écrit :

$$div(\rho\overrightarrow{V}) + \frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \rho q = 0 \qquad (3.7)$$

ρ : masse volumique de l'eau en Kg/m^3
ε : porosité du milieu poreux, sans dimension,
q : débit volumique d'eau prélevé (ou injecté) par unité de volume de VER,
V : vitesse de filtration de l'écoulement (vitesse de Darcy) en m/s.

- **Equation de mouvement : loi de Dracy** : Elle exprime, dans le cadre d'un modèle macroscopique, la relation fondamentale de la mécanique. La formulation la plus courante en hydrogéologie revêt la forme suivante :

$$\overrightarrow{V} = -K\overrightarrow{gradh} \qquad (3.8)$$

h est la charge hydraulique définie par la relation : $h = z + p/\rho g$. Lorsque la masse volumique ρ peut être considérée comme constante, la charge s'identifie au niveau piézométrique. La charge est alors matérialisée par la cote de la surface libre de l'eau.
K est le coefficient de Darcy ou permabilité du milieu poreux (m/s)

On fait appel également à une formulation plus générale de la loi de Darcy qui s'écrit :

$$\overrightarrow{V} = -\frac{K}{\mu}(\overrightarrow{gradp} + \rho g\overrightarrow{gradz}) \qquad (3.9)$$

p représente la pression macroscopique de fluide dans le VER en Kg/ms^2 ;
z est l'altitude en m ;

g est l'accélération de la pesanteur en m/s^2 ;
μ est la viscosité dynamique du fluide en Kg/ms ;
k est la perméabilité intrinsèque du milieu poreux en m^2.

- **Equations d'état** : Elles traduisent le comportement mécanique de l'eau et de la matrice rocheuse en fonction de la pression. En hydrogéologie, c'est le modèle élastique faisant intervenir les coefficients d'élasticité α et β :

Pour l'eau :

$$\frac{d\rho}{\rho} = \beta dp \tag{3.10}$$

Pour la matrice :

$$\frac{dV}{V} = -\alpha d\sigma = \alpha dp \tag{3.11}$$

σ représente la contrainte effective s'exerçant sur les grains au sein du VER de volume V. Cette contrainte est liée à la pression intersticielle de l'eau p (en l'absence de forces extérieures) par la relation dite de Terzaghi :

$$dp + d\sigma = 0 \tag{3.12}$$

Au final, la combinaison de ces trois groupes de relations conduit à l'équation aux dérivés partielles unique dite équation de diffusivité. Elle définit entièrement l'écoulement en permettant la détermination du champ de charge hydraulique h.

- **Equations de diffusivité** : Le VER adapté à l'écoulement en nappe doit considérer le domaine d'écoulement sur toute sa hauteur mouillée entre les cotes z_1 et z_2. Le niveau z_1 représente le substratum imperméable de la nappe, le niveau z_2 représente soit le recouvrement imperméable d'une nappe captive, soit la surface piézométrique d'une nappe libre dont la cote s'identifie en charge h. L'équation de diffusivité à trois dimensions dans un repère cartésien O_x, O_y, O_z supposé repère principal d'anisotropie pour la perméabilité et en intégrant selon la verticale O_z supposée direction principale d'anisotropie, il vient successivement :

$$\frac{\partial}{\partial x}(K_x\frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K_y\frac{\partial h}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(K_z\frac{\partial h}{\partial z}) = S_s\frac{\partial h}{\partial t} + q \tag{3.13}$$

Soit en intégrant et en tenant compte de $\partial h/\partial z = 0$ (hypothèse de Dupuit) :

$$\int_{z_1}^{z_2} \frac{\partial}{\partial x}(K_x\frac{\partial h}{\partial x})dz + \int_{z_1}^{z_2} \frac{\partial}{\partial y}(K_y\frac{\partial h}{\partial y})dz = \int_{z_1}^{z_2} S_s\frac{\partial h}{\partial t}dz + \int_{z_1}^{z_2} qdz \tag{3.14}$$

Soit encore, en admettant que z_1 et z_2 varient peu en fonction de x et y :

$$\frac{\partial}{\partial x}((\int_{z_1}^{z_2} K_x dx)\frac{\partial}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}((\int_{z_1}^{z_2} K_y dy)\frac{\partial}{\partial y}) = (\int_{z_1}^{z_2} S_s dz) + (\int_{z_1}^{z_2} qdz) \tag{3.15}$$

En posant :
$T_x = \int_{z_1}^{z_2} K_x dz$: Transmissivité de l'aquifère suivant les directions O_x $[m^2/s]$;
$T_y = \int_{z_1}^{z_2} K_y dz$: Transmissivité de l'aquifère suivant les directions O_y $[m^2/s]$;

S $= \int_{z_1}^{z_2} S_s dz$: Coefficient d'emmagasinement (sans dimension) ;
Q $= \int_{z_1}^{z_2} q dz$: Débit total prélevé par unité de surface.

L'équation de diffusivité à trois dimensions dans un repère cartésien dont la fonction niveau piézométrique $h(x, y)$ est la solution de cette équation, devient :

$$\frac{\partial}{\partial x}(T_x \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(T_y \frac{\partial h}{\partial y}) = Q + S\frac{\partial h}{\partial t} \tag{3.16}$$

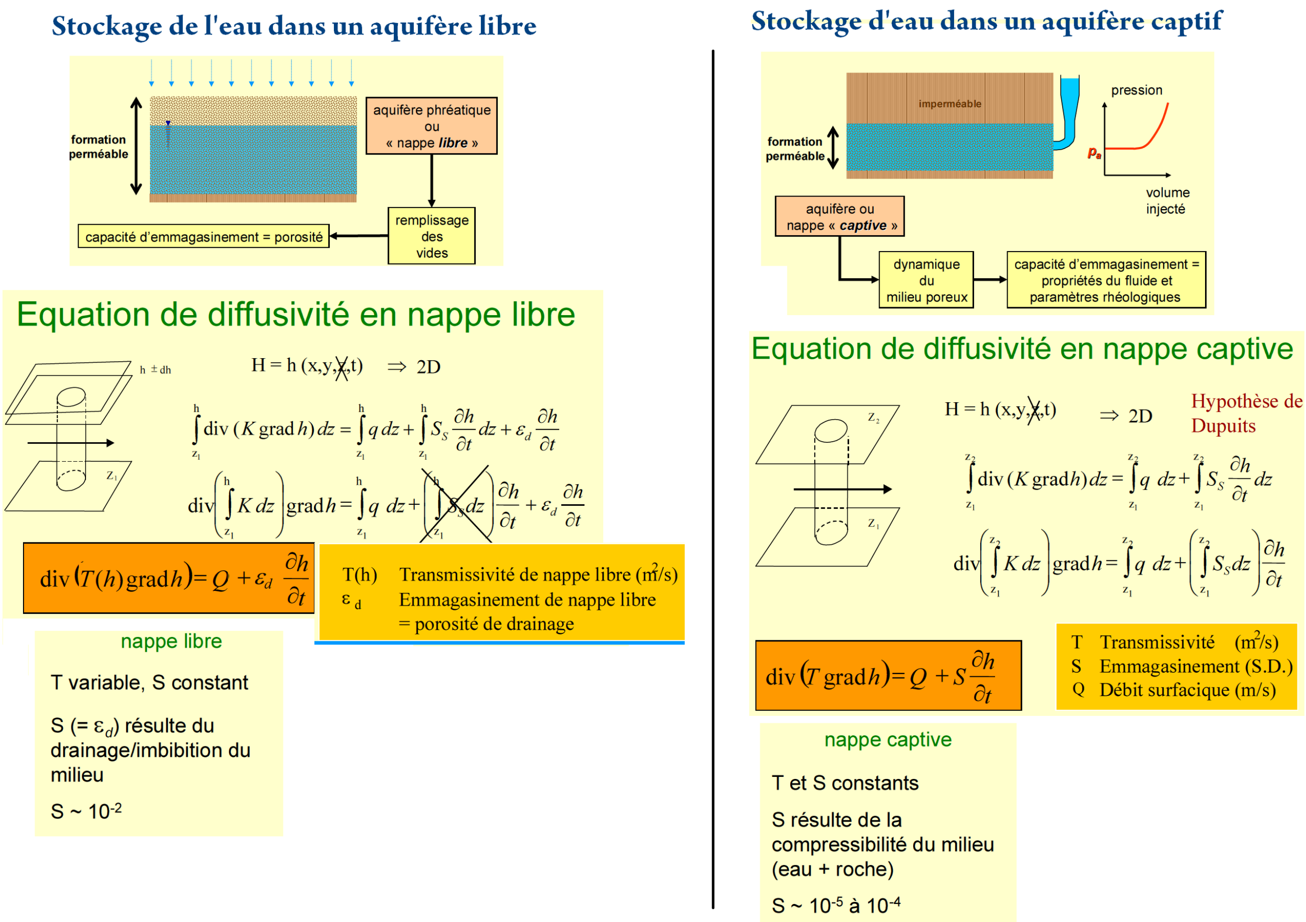

FIGURE 3.6 – Représentation des nappes libre et captive dans un modèle mathématique : équation de diffusivité (Ledoux, 2009)

La notion de transmissivité est introduite dans l'équation finale de diffusivité, elle s'étend au cas des nappes libres dans la mesure où l'on admet que cette T peut dépendre de la cote piézométrique h et de la distribution verticale de la perméabilité de l'aquifère. Par contre, la notion d'emmagasinement S n'est pas transposable aux nappes libres car le VER présente un volume variable assujetti aux variations de h. La notion de porosité de drainage ε_d du milieu poreux s'y substitue. Le stockage et le destockage d'eau correspondent dés lors à des phénomènes d'humidifcation ou de drainage du milien selon le sens de déplacement de la surface libre en fonction du temps.

3.2.2 Equation de dispersion à deux dimensions

Les mines, les produits pétroliers et l'agriculture sont des sources majeures de pollution de l'environnement. Les quantités de rejet, infiltrées des champs fertilisées par exemple, augmente les teneurs en nitrates dans le sol et les puits et dépasse les capacités d'autoépuration de certains rivières, aquifères et sols (Peng et al., 2002). Plusieurs modèles mathématiques ont été développés afin de simuler la qualité de l'eau dans les cours d'eau et réseau fluviatile, les lacs, les réservoirs aquifères et les sols, dans les zones urbaines et les estuaires (James, 1993). La prédiction environnementale est la quantification de l'état de l'environnement future, se basant sur ses conditions passées et actuelles. Elle fournit une solide base dans la gestion et la protection environnementales (Peng et al., 2002). La modélisation hydrogéochimique des aquifères en est un outil efficace, elle se base, simultanément, sur les équations de l'hydrodynamique (équation de diffusivité) et les équations de distribution des polluants (équation de dispersion).

Lorsqu'une quantité de matière est rejetée dans l'aquifère, il se forme un nuage qui est soumis aux effets des processus hydrodynamiques, qui sont la convection, la diffusion et la dispersion cinématique. Sous lesquelles est influencée la propagation d'éléments dissous dans une nappe. Ajoutons à cela, les échanges avec la phase solide et la phase eau immobile, et la dégradation ou la biodégradation.

L'équation de dispersion fait intervenir la concentration en éléments dissous C. L'hétérogénéité verticale de la perméabilité horizontale, qui était sans conséquence sur le niveau piézométrique, joue un rôle fondamental sur la vitesse de transfert du polluant en fonction de la variabilité des faciès lithologiques. C'est ainsi qu'on a mis en évidence le coefficient de dispersion qui dépend de la distance parcourue ou effet de parcours. Il existe une proportionnalité entre le coefficient de dispersion et la vitesse de l'eau, ce coefficient s'appelle dispersivité, α et est différent selon la direction par rapport à l'écoulement (Atteia, 2011) :

$$D_L = \alpha_L \nu \tag{3.17}$$

$$D_T = \alpha_T \nu \tag{3.18}$$

D_L et D_T sont respectievment la dispersion longitudinale et transversale et ν est la vitesse de l'eau dans le pore.

La dispersion cinématique est le résultat de l'existence d'un champ de vitesse réel fort complexe. Le transfert d'un polluant se décompse en terme convectif représentant le déplacement moyen et un terme dispersif intégrant les effets des hétérogénéités. La loi de transfert par dispersion représentant ces phénomènes de mélange analogue à la loi de Fick s'écrit (De Marsily, 1986) :

$$\overrightarrow{\phi} = -\overline{D}\,\overrightarrow{grad}C \tag{3.19}$$

avec $\overline{D}$ un coefficient de dispersion qui est un tenseur de dispersion et s'exprime dans les directions principales d'anisotropie comme suit :

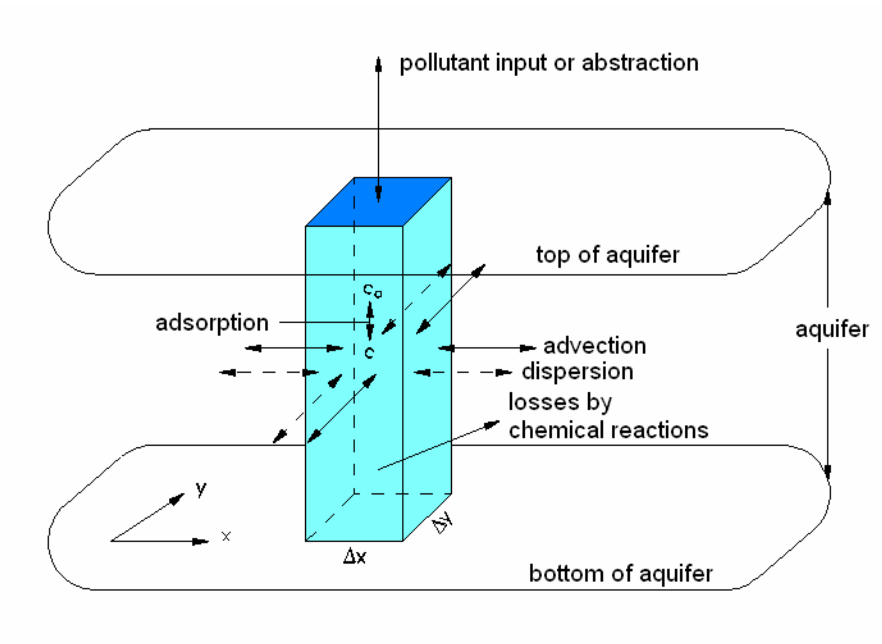

FIGURE 3.7 – Représentation de l'équation du transport (Rausch, 2010)

$$D = \begin{vmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{vmatrix}$$

Au final, l'équation de dispersion à deux dimensions (sans l'hétérogénéité verticale selon Z), s'exprimant dans un repère cartésien O_x, O_y (figure 3.7), s'écrit (Ledoux, 2000) :

$$\frac{\partial}{\partial x}(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x})+D_{xy}\frac{\partial C}{\partial y})+\frac{\partial}{\partial y}(D_{yx}\frac{\partial C}{\partial x}+D_{yy}\frac{\partial C}{\partial y})-\frac{\partial}{\partial x}(V_xC)-\frac{\partial}{\partial y}(V_yC) = \varepsilon_C\frac{\partial C}{\partial t}+(1-\varepsilon_C)\rho_S\frac{\partial F}{\partial t} \tag{3.20}$$

F est la concentration massique dans la fraction immobile ;
C est la concentration volumique dans l'eau mobile ;
V_x et V_y sont des composantes de la vitesse de Darcy moyenne horizontale.

Nous revenons, plus en détail, sur ces équations et le principe de la modélisation hydrogéochimique dans mon cours du même intitulé, dispensé en Master 2 Eau et Environnement à l'Université de Jijel.

Chapitre 4

Etapes de la modélisation

4.1 Introduction

Tout modèle doit comporter trois phases de construction (Bertrandias, 1994, Dassargues, 1995) :

— **Modèle conceptuel**, qui consiste à construire un modèle en adoptant une série d'hypothèses qui visent à simplifier le problème réel (géométrie et conditions des frontières, nature des matériaux géologiques, phases de fluides, mécanismes de transport, échanges, etc.) ;
— **Modèle mathématique**, au phénomène étudié est associé un modèle mathématique exprimé par une équation différentielle. Ce sont des équations exprimant les bilans des quantités extensives considérées (masse des fluides, des composés), des équations de flux, des conditions initiales et des conditions aux frontières ;
— **Modèle numérique**, souvent la solution analytique n'est pas adaptée (limites irrégulières, hétérogénéité du milieu, non-linéarité des des problèmes), le modèle numérique intervient. Il permet d'effectuer un cycle interne d'itérations d'un problème sur la valeur du paramètre non-linéaire. Sa solution est trouvée en des points discrets du domaine spatio-temporel, ses équations aux dérivées partielles sont remplacées par un système d'équations algébriques en fonction des variables d'état comme inconnues et la solution du problème est obtenue pour le set spécifié de valeurs des paramètres.

Sur un plan pratique, voici les différentes étapes de développement d'un modèle de circulation d'eau souterraine, comme schamétisées dans la figure 4.1, (Kessasra, 2015) :

— Définir l'objectif principal du modèle ;
— Collecter et analyser les données disponibles sur l'hydrosystème et construire sa base de données ;
— Développer une représentation de la réalité qui décrit ses caractéristiques importantes, sous forme systémique, afin d'aboutir au modèle conceptuel ;
— Traduire le fonctionnement obtenu en code informatique au travers d'équations mathématiques ;
— Calage du modèle en permanent, en ajustant les paramètres et coefficients sur une partie de la série de données ;
— Analyse des sensibilités du modèle et sa validation sur le reste de la série de données,

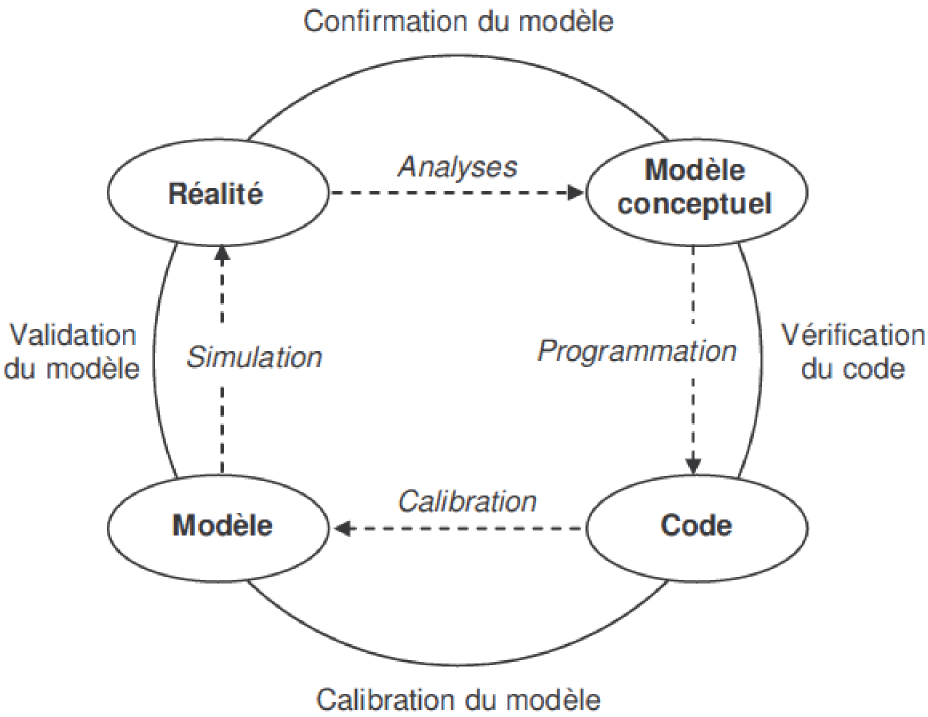

FIGURE 4.1 – Eléments de la terminologie de la modélisation (Schlesinger et al., 1979)

en vérifiant si le comportement de notre modèle se rapproche bien de la réalité ;
— Calage et tests de sensibilité en régime transitoire ;
— Dispositif d'exploitation par scénarios en vue d'une gestion rationnelle des ressources en eau.

4.2 Discrétisation du domaine d'écoulement

Le maillage est la représentation du domaine étudié par l'assemblage des cellules (Différences finis), d'éléments (Eléments finis) ou de régions (Eléments frontières et éléments analytiques) (Dassargues, 1995). Il existe trois approches de discrétisation du milieu naturel (figure 4.2) :

— **Différences finies**, qui permettent la résolution de problèmes régionaux d'écoulement des nappes, en une ou deux dimensions, dans des systèmes multicouches ou en trois dimensions. Toutefois, elle peut représenter les hétérogénéités des propriétés du milieu. La discrétisation de l'espace en mailles carrées ou rectangulaires régulières présente une grande facilité d'emploi aussi bien en ce qui concerne la mise en oeuvre des modèles que la programmation des algorithmes ;

— **Eléments finis**, plus compliquée à utiliser mais capable de traiter toutes les directions d'anisotropie. Elle est idéale pour résoudre les problèmes à limites mobiles, ceux ayant une surface libre et une interface abrupte entre eau douce et eau salée ou entre deux fluides immiscibles ;

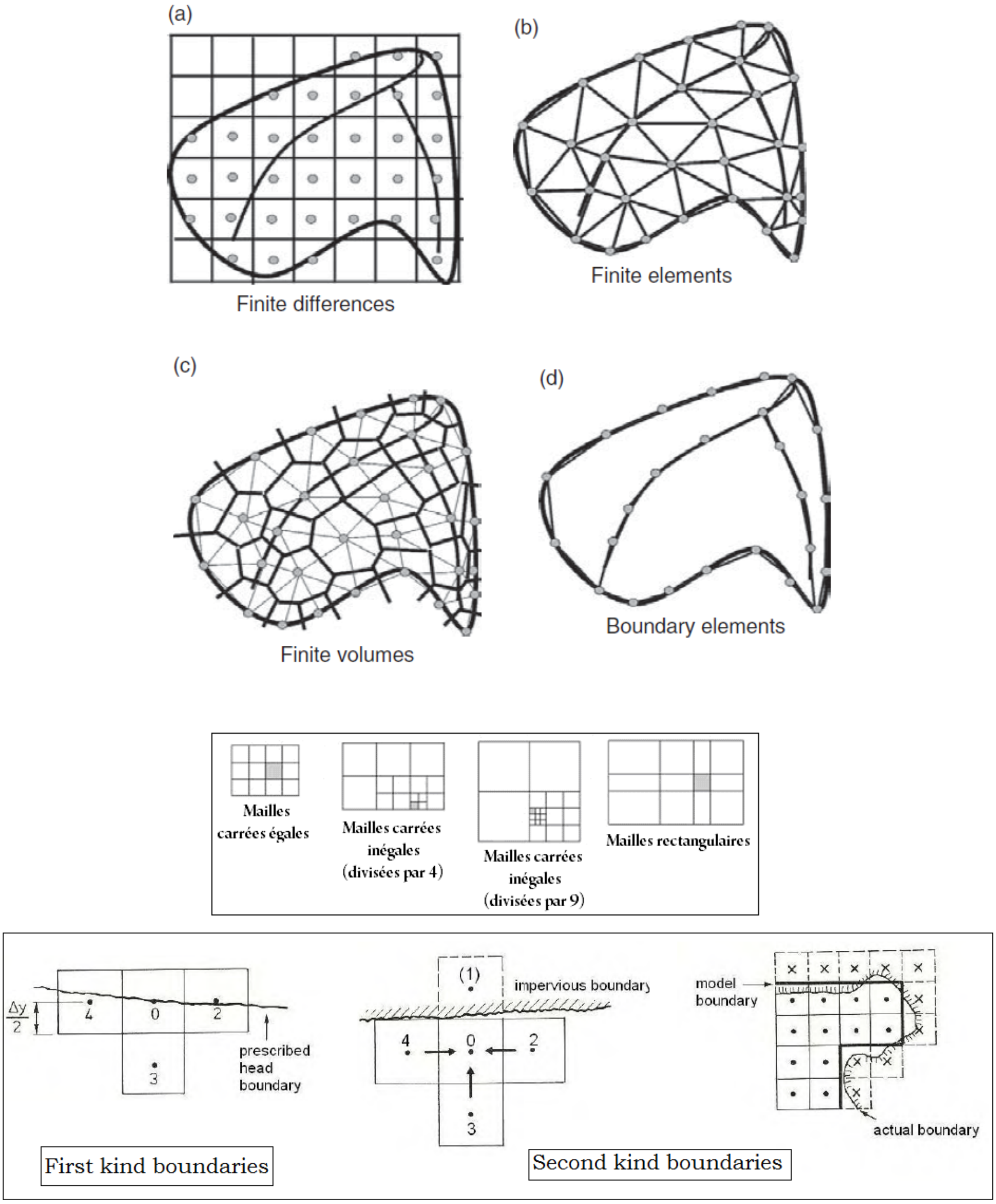

FIGURE 4.2 – Approches de discrétisation (Carrera et al., 2010), taille et forme des mailles (Ledoux, 2003) et positionnement des noeuds aux limites (Rausch, 2010)

— Des **approches d'éléments aux limites** ou d'intégrales de limites ont été proposées dont l'avantage principal réside en leur précision du calcul qui ne dépend pas de la taille des éléments utilisés.

L'approche classique, différences finies, consiste à découper le domaine en mailles géométriques. Le cas le plus simple est la grille constituée de mailles rectangulaires, mais il est possible de la raffiner dans les zones d'intérêt, soit en diminuant la taille des lignes et des colonnes : maillage écossais, soit en divisant localement les mailles en plusieurs petites mailles : maillage gigogne (Atteia, 2011). Cette technique devient, cependant, encombrante par suite de l'augmentation du nombre de mailles. Il est évident que pour une même précision, il y aura un plus grand nombre de mailles carrées égales que de mailles inégales, choisies plus petites dans les zones sensibles. Mais un modèle à mailles égales est beaucoup plus facile à utiliser. La résolution de l'équation se ferra soit au centre de la maille soit au noeud. La résolution ne respecte pas les frontières du domaine complexe étudié. Aux frontières, les mailles ne respectent pas correctement le champs d'étude (raffinement).

Par ailleurs, la taille du domaine modélisé dépend de l'échelle du projet : locale, intermédiaire, régionale et la portée spatiale des impacts prévisibles. Mais aussi de la précision souhaitée sur les calculs, des contours plus ou moins sinueux des limites, du nombre et de l'éloignement des singularités (puits) et enfin de la capacité de l'ordinateur (Ledoux, 2003). Selon l'étendue du domaine modélisé, les modèles se répartissent en (Wels et al., 2012) :

— Modèle de bassin-versant qui englobe entièrement le bassin-versant dans lequel le projet est localisé,
— Modèle aquifère, qui comprend l'étendue spatiale connue de l'aquifère principal,
— Modèle local, qui définit le domaine modélisé, basé sur des composantes spécifiques du projet à étudier (Retenue d'eau d'un barrage).

4.3 Conditions aux limites

La résolution des équations ne peut s'effectuer, sans formulation explicite de la condition initiale et des conditions aux limites. La condition initiale consiste à connaître la distribution du potentiel hydraulique en tout point du domaine au temps initial. Les conditions aux limites concernent les règles d'échange des flux entre le domaine modélisé et le milieu extérieur (flux d'eau, flux de matière migrant avec l'eau, ou flux de chaleur). Les limites du domaine d'étude doivent coïncider avec des limites physiques où la description des flux puisse être effectuée de manière conceptuelle à partir des observations sur le terrain. Les conditions aux limites sont de trois types, comme le montre la figure 4.3, (De Marsily, 2004) :

— Conditions aux limites de type Dirichlet qui spécifient les potentiels imposés aux frontières du domaine ;
— Conditions aux limites de type Neumann qui spécifient le flux imposé aux limites du domaine ;
— Conditions aux limites de troisième type (de Cauchy) qui donnent les combinaisons linéaires existants entre le flux et le potentiel hydraulique aux frontières du

domaine.

4.3.1 Potentiel imposé

Conditions de charges ou de niveaux piézométriques imposés (Potentiel imposé, conditions de Dirichlet), elles reviennent à spécifier le potentiel (ou la pression) sur les limites où celui-ci est indépendant des flux échangés. Ce sera généralement le long du contact nappe-rivière ou un plan d'eau (Lac, mer, etc.), la charge est constante imposée par la côte de l'eau dans la rivière. Les précipitations sont supérieures au flux d'eau pouvant s'écouler dans la nappe, la charge est voisine de la côte du sol. En pratique, ces conditions peuvent être choisies au contact d'un aquifère et des eaux libres de surface, lorsque les lignes équipotentielles peuvent être distingués (Barrage). Via ce type de limites, des flux énormes peuvent entrer ou sortir du modèle.

4.3.2 Flux imposé

Conditions de flux ou de débit imposé (Conditions de Neumann) : les échanges avec le milieu extérieur sont réglés par un flux d'eau traversant une portion donnée de limite indépendamment des hauteurs piézométriques. On distingue :

- la limite à flux nul ($\frac{\partial h}{\partial n} = 0$) : Si la limite correspond à une ligne de courant, aucun flux n'est toléré perpendiculairement, le flux spécifié est nul (Conditions de frontières imperméable). Par exemple, au contact d'une formation aquifère avec un imperméable.

- les limites à flux imposé non-nul : un affleurement dans une zone où le taux d'infiltration de la pluie est inférieur aux possibilités d'ingestion de la nappe. C'est le taux d'infiltration de la pluie qui fera le flux entrant. On a également un prélèvement à débit imposé dans un ouvrage (Puits, forages) constitue également une limite à flux imposé.

4.3.3 Conditions de Fourier

Imaginons une rivière drainant (ou alimentant) une nappe libre mais dont le fond serait colmaté par une couche de vase peu perméable. La différence de charge $\Delta h = h_{riv} - h_{npp}$ crée le gradient nécessaire à l'écoulement d'un certain débit q par unité de surface de contact nappe-rivière d'après la loi de Darcy :

$$q = K' \frac{\Delta h}{e'} = K' \frac{h_r - h}{e'} \tag{4.1}$$

Le débit q est donné par la loi de Darcy :

$$q = -K \frac{\partial h}{\partial n} \tag{4.2}$$

Par conservation du flux à la traversée de l'interface AB, on peut écrire :

$$-K \frac{\partial h}{\partial n} + \frac{K'}{e'} h = \frac{K'}{e'} h_r \tag{4.3}$$