Chapitre 4

Modèles en en hydrogéologie

4.1 Objectifs et buts de la modélisation

Les objectifs de la modélisation hydrogéologique se repose sur trois aspects (Bear, 1993) :

— mieux comprendre le fonctionnement du système ;
— mettre en oeuvre d'un dispositif de mesures (pompages, traçages, etc.) ;
— prédire le comportement du système en réponse à des sollicitations.

L'utilité des modèles 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. La gestion du système S comprend 3 actions : prévoir, agir et contrôler. Les décisions, comme les lâchers de barrages, les restrictions (action d'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 objectives à des mesures afin d'évaluer si le 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. 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. Le gestionnaire disposerait alors d'informations pour prévoir le sens échanges nappes-rivières et les réserves encore disponibles dans les aquifères (Tableau 4.1).

Les modèles hydrologiques sont destinés à répondre aux problèmes de gestion des eaux superficielles (débits). Ils permettent 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 4.1). En outre, les modèles hydrogéologiques sont destinés aux problèmes de gestion des aquifères en calculant les niveaux piézométriques 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 calculés par le modèle hydrologique afin de définir les débits à l'exutoire du bassin versant. Il faut donc utiliser des modèles couplés qui intègrent la totalité des processus : SHE, MODCOU, NEWSAM.

TABLE 4.1 – 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 4.1 – Schématisation du modèle couplé eaux superficielles-eaux souterraines (Barthel, 2006)

4.1.1 Equation de diffusivité

Les mouvements de l'eau et de contaminants sont affectés par plusieurs processus. Ils sont reliés à trois catégories de modèles : modèle d'écoulement d'eau souterraine, modèle d'écoulement multiphasique (sol, eau, air) et modèle d'écoulement des contaminants dissous dans l'eau souterraine. Les modèles en hydrogéologie sont contraints de considérer que deux processus d'écoulement d'eau souterraine, écoulement en réponse à un gradient de potentiel hydraulique et la perte ou le gain d'eau à partir d'une source, recharge ou pompage en puits.

L'équation générale des écoulements en milieux variablement saturés est déduite du *principe de conservation de masse* et de la *loi de Darcy*. L'*Equation de continuité* traduit la conservation de la masse de fluide à l'intérieur de tout Volume Elémentaire Représentatif (VER). Elle exprime l'état continu d'un fluide, qu'il ne peut y avoir ni apport extérieur ni prélèvement de matière. La masse se conserve au cours de l'écoulement. Elle s'écrit :

$$div(\rho\overrightarrow{V}) + \frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \rho q = 0 \tag{4.1}$$

ρ est la masse volumique de l'eau ou densité du fluide en Kg/m^3, ε est la porosité du milieu poreux, sans dimension, q est le débit volumique d'eau prélevé (ou injecté) par unité de volume de VER, V est la vitesse de filtration de l'écoulement ou vitesse de Darcy en m/s, W est le taux de source-puits, t est le temps, x, y, z représentent les coordonnées cartésiennes du système.

FIGURE 4.2 – Représentation de l'équation de continuité (Ledoux, 2009)

L'*Equation de mouvement ou loi de Dracy* 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 :

$$\overrightarrow{V} = -K\overrightarrow{grad}h \tag{4.2}$$

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 :

$$\overrightarrow{V} = -\frac{K}{\mu}(\overrightarrow{grad}p + \rho g\overrightarrow{grad}z) \tag{4.3}$$

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.

Maintenant, prenons un exemple simple dans le développement de l'équation différentielle qui pourrait être incorporé dans un modèle mathématique. Considérons le cas le plus simple d'écoulement d'eau souterraine, l'énoncé mathématique de conservation de masse de fluide s'écrit :

$$-[\frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho q_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho q_z)}{\partial z}] \pm \rho W = \frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial t} \tag{4.4}$$

Cette équation est développée en prenant un cube en milieu poreux et représentant des flux entrants et sortants, le stockage de masse de fluide et les sources ou puits (Freeze and Cherry, 1979). Les trois premiers termes (3.10) incorporent tous les processus contribuant au mouvement de masse ou mouvement de masse des éléments dissous et le quatrième terme représente les sources et puits. Chaque problème de flux qui peut être modélisé est décrit par une ou plusieurs équations de cette forme. L'équation de continuité (3.11) est un cadre mathématique général qui doit être affiné en fournissant une description plus précise de chacun des processus impliqués. Cela exprime des flux de masse en termes de force motrice (gradients hydraulique) et des termes de sources-puits. Considérons le développement des équations de flux de masse de base pour le cas le plus simple, celui de flux d'eau souterraine. Freeze and Cherry en 1979, ont simplifié l'équation (3.10) en interprétant le terme sortie d'eau à partir du stockage à cause d'une baisse dans la charge et en supposant que la densité du fluide est constante, ils divisent l'ensemble des termes par ρ. L'équation de continuité peut donc être réécrite sous la forme suivante :

$$-[\frac{\partial(q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(q_y)}{\partial y} + \frac{\partial(q_z)}{\partial z}] \pm W = S_s\frac{\partial h}{\partial t} \tag{4.5}$$

Avec S_S est le coefficient d'emmagasinement spécifique et h est la charge hydraulique.

L'équation de continuité (3.11) a besoin d'être encore affinée en fournissant une description plus précise du processus d'écoulement, en exprimant des flux de masse en termes de force motrice ou gradients hydrauliques. Pour l'écoulement d'eau souterraine, cette étape implique le remplacement du débit spécifique en utilisant l'équation de Darcy. Celle-ci stipule que le flux d'eau à travers un milieu poreux sur une surface transversale unitaire est liée au produit du gradient hydraulique et une constante de proportionnalité appelée conductivité hydraulique. Cette dernière est liée à la perméabilité du milieu. Mathématiquement, cette importante loi physique peut s'écrire comme suit :

$$q_x = -K(\psi)\frac{\partial h}{\partial x} \tag{4.6}$$

$$q_y = -K(\psi)\frac{\partial h}{\partial y} \tag{4.7}$$

$$q_z = -K(\psi)\frac{\partial h}{\partial z} \tag{4.8}$$

Où q_x est un débit spécifique, ou vitesse de Darcy, K est la perméabilité avec les composantes de directions x, y et z, alignées sur les principaux axes de propriétés du matériau et ψ est la charge de pression. Les signes négatifs indiquent que l'eau s'écoule dans la direction opposée que l'accroissement du potentiel hydraulique. Remplaçant la loi de Darcy (q_x, q_y, q_z) dans l'équation 3.11, l'équation 3.15 fournit une forme d'équation adaptée à la modélisation des écoulements d'eau souterraine :

$$\frac{\partial}{\partial x}[K(\psi)\frac{\partial h}{\partial x}] + \frac{\partial}{\partial y}[K(\psi)\frac{\partial h}{\partial y}] + \frac{\partial}{\partial z}[K(\psi)\frac{\partial h}{\partial z}] \pm W = S_s\frac{\partial h}{\partial t} \tag{4.9}$$

Dans cette équation, le terme sources-puits n'a pas besoin de nouvelle élaboration parce que pour le cas de flux d'eau souterraine, il n'est qu'une simple constante liée au pompage ou au taux d'injection par volume d'unité. Ainsi, 3.15 est une équation différentielle utilisée pour modéliser le flux d'eau souterraine en réponse à un gradient de potentiel et soumis aux effets de pompage/injection. Dans certains cas, les propriétés de fluides comme la densité ou la viscosité varient significativement dans le temps ou dans l'espace, à cause des changements de température ou de la composition chimique. Quand le système est non-homogène, les relations entre niveaux d'eau, charges, pressions et vitesses ne sont pas simples. Le calcul des taux de débits et des directions exige alors des données sur la perméabilité intrinsèque, la densité et la viscosité (au lieu de la conductivité hydraulique), la pression de fluide et l'élévation (au lieu du gradient hydraulique).

FIGURE 4.3 – Ecoulements des eaux souterraines modélisés en 2D et 3D dans un aquifère (Zheng, 2011)

La combinaison de ces deux groupes de relations et les *équations d'état* conduit à l'équation aux dérivés partielles unique dite *équation de diffusivité*. Elle définit l'écoulement en permettant la détermination du champ de charge hydraulique h. Les *Equations d'état* 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 :

$$\frac{d\rho}{\rho} = \beta dp \tag{4.10}$$

Pour la matrice :

$$\frac{dV}{V} = -\alpha d\sigma = \alpha dp \tag{4.11}$$

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 :

$$dp + d\sigma = 0 \tag{4.12}$$

4.1.2 Equation d'écoulement en milieu non-saturé

L'écoulement en milieu non-saturé est le type d'écoulement fréquemment rencontré dans la zone vadoze. Il est donc important d'y connaître les lois de l'écoulement qui le régisse. En milieu non-saturé, la conductivité hydraulique K diminue avec la baisse de la teneur en eau car la section d'écoulement rétrécit et la tortuosité augmente. Ainsi, la conductivité hydraulique est une fonction de la teneur en eau Θ ou de la succion h. Étant donné que l'équation pour la phase air n'est pas requise car cette phase est considérée comme immobile (Freeze and Cherry, 1979), prenons Θ comme teneur en eau volumique et Θ' comme degré de saturation, l'équation de continuité établie pour l'eau s'écrit :

$$-[\frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho q_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho q_z)}{\partial z}] = \frac{\partial(\rho\epsilon\Theta')}{\partial t} \tag{4.13}$$

Formulons l'hypothèse de supprimer ρ car la densité de l'eau est considérée comme constante, l'équation devient :

$$-[\frac{\partial(q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(q_y)}{\partial y} + \frac{\partial(q_z)}{\partial z}] = \frac{\partial(\Theta')}{\partial t} \tag{4.14}$$

Réécrite en termes de potentiel de pression ou succion ψ, où la loi des potentiels permet d'écrire :

$$h = \psi + z \tag{4.15}$$

avec z comme potentiel gravitationnel

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\partial\theta}{\partial t}.\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{4.16}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\partial\theta}{\partial t}.C(\psi)\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{4.17}$$

$C(\psi)$ est la teneur spécifique en humidité, l'équation de continuité en milieu non-saturé s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial x}[K(\psi)\frac{\partial\psi}{\partial x}] + \frac{\partial}{\partial y}[K(\psi)\frac{\partial\psi}{\partial y}] + \frac{\partial}{\partial z}[K(\psi)(\frac{\partial\psi}{\partial z+1)}] = C(\psi)\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{4.18}$$

4.1.3 Equation d'écoulement en milieu saturé

L'équation de continuité pour la phase eau s'écrit :

$$-[\frac{\partial(\rho_w q_{wx})}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_w q_{wy})}{\partial y} + \frac{\partial(\rho_w q_{wz})}{\partial z}] = \frac{\partial(\rho_w\epsilon S_w)}{\partial t} \tag{4.19}$$

w exprime l'eau, le terme ϵS_w reflète le fait que la porosité contient des fractions immiscibles pour les deux.

Substituant maintenant les formes de pression de l'équation de Darcy, quand la conductivité hydraulique est exprimée en perméabilité k, perméabilité relative k_r et viscosité dynamique ν :

$$q_{wx} = -\frac{kk_{rw}}{\mu_w}(\frac{\partial p_w}{\partial x}) \tag{4.20}$$

$$q_{wy} = -\frac{kk_{rw}}{\mu_w}(\frac{\partial p_w}{\partial y}) \tag{4.21}$$

$$q_{wz} = -\frac{kk_{rw}}{\mu_w}(\frac{\partial p_w}{\partial z} + \rho_w g) \tag{4.22}$$

Nous obtiendrons l'équation l'équation qui va être résolue pour la pression et la saturation en eau dans le cas d'un milieu saturé en eau :

$$\frac{\partial}{\partial x}[\frac{k\rho_w k_{rw}}{\mu_w}\frac{\partial p_w}{\partial x}] + \frac{\partial}{\partial y}[\frac{k\rho_w k_{rw}}{\mu_w}\frac{\partial p_w}{\partial y}] + \frac{\partial}{\partial z}[\frac{k\rho_w k_{rw}}{\mu_w}(\frac{\partial p_w}{\partial z} + \rho_w g)] = \partial\frac{(\rho_w \epsilon S_w)}{\partial t} \tag{4.23}$$

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 :

$$\frac{\partial}{\partial x}(K_x\frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K_y\frac{\partial h}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(K_z\frac{\partial h}{\partial z}) = S_s\frac{\partial h}{\partial t} + q \tag{4.24}$$

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

$$\int_{z_1}^{z_2}\frac{\partial}{\partial x}(K_x\frac{\partial h}{\partial x})dz + \int_{z_1}^{z_2}\frac{\partial}{\partial y}(K_y\frac{\partial h}{\partial y})dz = \int_{z_1}^{z_2} S_s\frac{\partial h}{\partial t}dz + \int_{z_1}^{z_2} qdz \tag{4.25}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial x}((\int_{z_1}^{z_2} K_x dx)\frac{\partial}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}((\int_{z_1}^{z_2} K_y dy)\frac{\partial}{\partial y}) = (\int_{z_1}^{z_2} S_s dz) + (\int_{z_1}^{z_2} qdz) \tag{4.26}$$

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 = $\int_{z_1}^{z_2} qdz$: Débit total prélevé par unité de surface.

Figure 4.4 – Représentation des nappes libre et captive dans un modèle mathématique : équation de diffusivité (Ledoux, 2009)

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 :

$$\frac{\partial}{\partial x}(T_x \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(T_y \frac{\partial h}{\partial y}) = Q + S\frac{\partial h}{\partial t} \tag{4.27}$$

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.