Structure d'origine







RAPPORT DE STAGE



HydroSciences Montpellier

Présenté par

CARRIERE Simon



Modélisation hydrogéologique à grande échelle choix conceptuels et calibration Exemple du bassin de la Dyle (Belgique)

Directeur de stage : Alain DASSARGUES

Master 2 : Recherche Eau et Environnement

Mention : Biologie Géosciences Agroressources Environnement

Spécialité : Sciences de l'Eau dans l'Environnement Continental

Année Universitaire 2009/2010

MODELISATION HYDROGEOLOGIQUE A GRANDE ECHELLE CHOIX CONCEPTUELS ET CALIBRATION Exemple du bassin de la Dyle (Belgique)

SOMMAIRE

I – INTRODUCTION	5
II - CONCEPTS DE LA MODELISATION HYDROGEOLOGIQUE A GRANDE ECHEL	LE
ET LOGICIEL UTILISE	6
II.1 MODELISATION A GRANDE ECHELLE	6
II.2 PRESENTATION DU CODE SUFT3D ET DE LA METHODE H.F.E.M.C	7
II.3 EQUATIONS ET TECHNIQUES DE RESOLUTION	8
II.3.1 Ecoulement	8
II.3.2 Transport	9
II.3.2.1 Principe du calcul d'advection-dispersion	9
II.3.2.2 Technique des « mixing cells »	9
II.3.2.3 Gestion du pas de temps en transport	10
II.3.3 Résolutions mathématiques	10
II.4 CONDITIONS AUX LIMITES	10
II.4.1 Condition de 1 ^{er} type ou de potentiel imposé (Dirichlet)	11
II.4.2 Condition de 2 ^{ème} type ou de flux imposé (Neumann)	11
II.4.3 Condition de 3 ^{ème} type ou de flux dépendant d'une différence de potentiel	
(Fourier)	12
II.5 CALIBRATION DES MODELES HYDROGEOLOGIQUES	12
II.5.1 Principe	12
II.5.2 Etude statistique	13
II.5.3 Optimisation	14
III – MODELISATION DU BASSIN HYDROGEOLOGIQUE DE LA DYLE	16
III.1 INTRODUCTION	16
III.2 PRESENTATION DE LA ZONE	16
III.2.1 Géographie du bassin de la Dyle	16
III.2.2 Géologie du bassin de la Dyle	17
III.3 PRINCIPAUX TYPES DE DONNEES	18
III.3.1 Données géométriques permettant la construction du maillage	18
III.3.2 Données de sollicitations	19
III.3.3 Données historiques utiles au calage	21
III.4 CHOIX CONCEPTUELS ET CONSTRUCTION DU MAILLAGE	21
III.4.1 Les choix conceptuels généraux	21
III.4.1.1 Définition des limites du domaine	21
III.4.1.2 Prise en compte de l'hétérogénéité du domaine	23
III.4.1.3. Les équations utilisées	24
III.4.2 Génération du maillage	24
III.4.3 Définition des sous-domaines	27
III.4.3.1 Découpage horizontal	27
III.4.3.2 Découpage vertical	28
III.4.4 Conditions aux limites	29
III.4.4.1 Conditions aux limites externes	29
III.4.4.2 Conditions aux limites internes	30
III.5 CALIBRATION DU MODELE EN ECOULEMENT PERMANENT	30
III.5.1 Etude de sensibilité des paramètres avec UCODE	31
III.5.2 Optimisation des paramètres avec PEST	32
III.5.3 Résultats de la calibration sur le modèle de la Dyle	33

III.6 CALIBRATION DU MODELE EN TRANSPORT	35
III.6.1 Hypothèses spécifiques au calcul du transport de nitrates	35
III.6.1.1 Modification du maillage	35
III.6.1.2 Modèle de transport	35
III.6.1.3 Le phénomène de dénitrification	
III.6.2 Optimisation des paramètres de transport	
III.6.3 Résultats de la calibration sur le modèle de la Dyle	
IV - SIMULATION DU TRANSPORT DE NITRATES POUR DIFFERENTS	
SCENARIOS	40
IV.1 PRESENTATION DES SCENARIOS A L'HORIZON 2050	40
IV.2 RESULTATS DES SIMULATIONS	41
V – CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES	45
BIBLIOGRAPHIE	46
ANNEXES	
TABLE DES ILLUSTRATIONS	55
REMERCIEMENTS	56
RESUME	57

I – INTRODUCTION

La gestion et la protection des eaux souterraines passent aujourd'hui par la modélisation hydrogéologique. Cette approche permet de comprendre et de prévoir le comportement de systèmes hydrogéologiques complexes vis-à-vis des sollicitations anthropiques qui sont variables dans le temps et l'espace. La modélisation numérique est un moyen de répondre rigoureusement aux problèmes posés en apportant une réponse basée sur des concepts physiques.

Dans le contexte réglementaire actuel qui est celui de la Directive Cadre sur l'Eau, les modèles à l'échelle du bassin versant devraient de plus en plus voir le jour. En effet, cette législation impose aux états membres de gérer l'eau de manière intégrée à l'échelle de la masse d'eau. Bien que complexes à mettre en œuvre, les modèles à l'échelle de la masse d'eau présentent de multiples intérêts. En les couplant à des modèles agronomiques et hydrologiques, il est possible de modéliser les transferts sur l'ensemble du bassin versant, depuis la percolation de l'eau dans les premiers centimètres du sol jusqu'à l'embouchure du fleuve. On obtient ainsi une modélisation intégrée du cycle terrestre de l'eau. Le modèle construit deviendrait alors un outil essentiel afin de valider toutes les études réalisées à une échelle plus réduite au sein du bassin versant. Un des principaux intérêts sera d'étudier les pollutions diffuses ainsi que leurs évolutions possibles dans le futur. C'est cette dernière capacité qu'il a été choisi d'expliciter à la fin de ce document à travers le cas des nitrates afin de dévoiler la pertinence de l'outil développé au cours du stage.

Le laboratoire d'Hydrogéologie et de Géologie de l'Environnement de l'Université de Liège a acquis depuis plusieurs années des compétences et développé des outils nécessaires au bon déroulement de ce stage. Jusqu'ici, les principaux travaux de modélisation à grande échelle avec le code SUFT3D ont été entrepris sur le bassin du Geer (ORBAN, 2008 et GODERNIAUX, 2010) et de la Haine. Le nouveau modèle ici développé a permis de valider les techniques déjà développées et de solutionner de nouveaux problèmes spécifiques posés.

Ce document s'articule en trois grands volets, avec une première partie théorique récapitulant les notions de base nécessaires à la compréhension de ce rapport. La seconde partie explicite les solutions apportées aux problèmes posés sur le bassin versant de la Dyle. La troisième et dernière partie propose des scénarios d'évolutions de la teneur en nitrates à l'horizon 2050 dans le bassin versant de la Dyle.

II – CONCEPTS DE LA MODELISATION HYDROGEOLOGIQUE A GRANDE ECHELLE ET LOGICIEL UTILISE

Dans le paragraphe suivant, les concepts de la modélisation hydrogéologique à grande échelle sont décrits au travers de ce qui est pratiqué dans le code SUFT3D (Satured and Unsatured Flow and Transport in 3D).

II.1 MODELISATION A GRANDE ECHELLE

L'Université de Liège a acquis au cours des dernières années une certaine expérience concernant les modélisations à grande échelle (ORBAN 2008, GODERNIAUX, 2010 et WILDEMERSH (en cours)).

Les principales difficultés rencontrées lors d'une modélisation à grande échelle sont :

- La complexité et l'hétérogénéité des systèmes géologiques et hydrogéologiques rencontrés. En effet, en augmentant la surface de la zone modélisée, on est confronté à une géologie plus diversifiée donc plus complexe à modéliser.
- L'hétérogénéité du degré de caractérisation des différentes formations aquifères et aquicludes rencontrées. Si les formations aquifères productives sont généralement bien connues (géométrie et propriétés hydrauliques), il en est tout autrement pour les formations moins productives et aquicludes. Il est donc difficile de représenter ces dernières formations qui font pourtant partie intégrante du bassin versant et peuvent avoir des rôles d'importance majeure pour l'hydrodynamique ou le transport.
- La représentativité des paramètres estimés car les résultats des quelques dizaines d'essais de pompage ne renseignent que sur une infime partie de la zone étudiée.
- La quantité de données requiert l'utilisation d'un Système d'Information Géographique (S.I.G.) mais malgré tout, la phase de gestion des données reste une opération longue et fastidieuse.
- Le calage du modèle pose quelques problèmes, notamment concernant la représentativité des points qui servent de référence. De plus, avec des éléments de plusieurs centaines de mètres de côté, les piézomètres qui servent de référence ne se trouvent pas systématiquement sur un nœud. Ils peuvent au contraire se positionner au centre d'un élément à plus de cent mètres d'un nœud.
- Enfin, les temps de calculs représentent un réel problème. Avec des modèles de plusieurs milliers d'éléments, la résolution numérique peut être assez longue. Cela est particulièrement vrai pour la phase de calibration automatique en régime transitoire qui n'est actuellement pas réalisable et pour laquelle il faudrait compter plusieurs semaines, voire plusieurs mois de temps C.P.U. (Central Processing Unit).

Partant de ces constats, l'équipe d'Hydrogéologie de l'Université de Liège a développé une méthodologie et des outils pour parvenir à réaliser des modèles à échelle régionale.

L'ensemble des choix qui seront proposés par la suite sont le résultat d'un compromis entre précision du modèle et temps de calculs.

II.2 PRESENTATION DU CODE SUFT3D ET DE LA METHODE H.F.E.M.C.

Le développement du code SUFT3D par l'Université de Liège a commencé durant les années 1990 (CARABIN and DASSARGUES, 1999). Depuis, les travaux pour valider et optimiser ce code ont été nombreux (e.g. BROUYERE, 2001 ; ORBAN et *al.* 2005 ; ORBAN et *al.*, 2008 ; ORBAN, 2008 ; BROUYERE et *al.* 2009 ; BROUYERE, 2009). Le code SUFT3D a notamment été développé pour répondre à la problématique de modélisation à grande échelle.

La méthode H.F.E.M.C. (Hybrid Finite Element Mixing Cell) consiste à subdiviser le maillage initial en sous-domaines (ORBAN *et al.*, 2005 ; ORBAN et al., 2008 ; BROUYÈRE et al., 2009). Cette division peut se faire selon des critères tels que la géologie ou les sous-bassins versants. La connexion entre les sous-domaines générés est assurée par des conditions frontières internes de type Dirichlet, Cauchy ou Fourier (cf partie II.4.3, p 12). Chaque sous-domaine peut se voir attribuer un modèle mathématique différent selon le degré de connaissance du milieu. Les différents modèles mathématiques implémentés dans le code SUFT3D sont récapitulés de manière exhaustive à la figure 1.

		Transport		
		Simple linear	Distributed	Advection-
		reservoir	mixing model	dispersion
Flow	Simple linear reservoir	ок	not possible	not possible
	Distributed linear reservoir	ОК	ок	not possible
	Flow in porous media	ок	ок	ок

Figure 1 : Modèles mathématiques d'écoulement et de transport dans le code SUFT 3D (Orban et al. 2008).

L'utilisation de ce code est caractérisée par une phase de préprocessing et une phase de postprocessing (cf. figure 2).

La première étape consiste à gérer les données avec un S.I.G. puis de générer le maillage avec un logiciel spécialisé *Groundwater Modelling System* (G.M.S.®). Les fichiers d'entrée du code SUFT3D sont préparés dans les interfaces : *MESHDIV, RIVERMESH* et *MAIN*.

La phase de postprocessing consiste à visualiser les résultats avec le logiciel G.M.S.® proposant différents formalismes graphiques.



Figure 2 : Schéma général du principe (André et al., 2008)

II.3 EQUATIONS ET TECHNIQUES DE RESOLUTION

II.3.1 Ecoulement

Dans le cadre de cette étude, les écoulements ont été modélisés par résolution de l'équation de Richards. Cette équation permet de simuler les écoulements d'eau dans la zone saturée de l'aquifère ainsi que dans la zone non saturée (Z.N.S.). Des lois de rétention de l'eau dans la Z.N.S., telles que celle de Van Genuchten (VAN GENUCHTEN, 1980), permettent de représenter les relations entre teneur en eau et conductivité hydraulique. De ce fait, les transferts dans la Z.N.S. et le dénoyage d'une partie de l'aquifère causé par les variations du niveau de la nappe sont correctement pris en compte.

L'équation d'écoulement est implémentée dans le code SUFT3D sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\theta) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right] \tag{1}$$

où : $K(\theta)$ est la conductivité hydraulique exprimée en fonction de la teneur en eau θ ; *h* est le potentiel de pression ; *z* est la coordonnée verticale.

II.3.2 Transport

Les deux équations les plus couramment utilisées pour le transport en modélisation à grande échelle sont l'équation d'advection-dispersion et la technique des « mixing cells ». Le choix d'une ou de l'autre équation est déterminé selon le type de formations modélisées.

II.3.2.1 Principe du calcul d'advection-dispersion

Le transport des solutés dans le code SUFT3D peut être calculé en résolvant l'équation d'advection-dispersion qui permet de prendre en compte les phénomènes d'advection, de dispersion, de dégradation et de piégeage. L'ensemble de ces paramètres n'interviendront pas nécessairement au cours de toutes les modélisations. Seuls les phénomènes majeurs seront représentés (ORBAN, 2008).

$$\theta_m \frac{\partial C_m}{\partial t} = -\underline{\nabla} \cdot (\underline{v}_D \ C_m) + \underline{\nabla} \cdot (\theta_m \ \underline{\underline{D}}_h \ \underline{\nabla} C_m) - \lambda \ \theta_m \ C_m - \alpha \ (C_m - C_{im}) + q \ (C' - C_m)$$
(2)

où : θ *m* est la porosité cinématique ; *C* est la concentration dans l'élément ; *t* est le temps; *v*_D est le flux de Darcy; *D*_h est la dispersion hydrodynamique ; *q* est le flux volumétrique associé au terme puits ou source; *C*'est la concentration associée à cette source ; *a* est le coefficient d'échange entre l'eau mobile et immobile ; λ est le coefficient de dégradation ; *C*_{im} est la concentration de l'eau immobile.

II.3.2.2 Technique des « mixing cells »

Dans certaines circonstances, l'équation de transport « mixing cells » peut se substituer à l'équation d'advection-dispersion. Ce type de calcul amène à considérer qu'à l'instant même où le soluté entre dans un élément, il est automatiquement mélangé au volume total d'eau contenu dans l'élément. Cette équation introduit de la dispersion numérique. Cette approximation est considérée acceptable en particulier lorsque l'on travaille avec une pollution diffuse comme les nitrates (BARRY D. A. and BAJRACHARYA 1993 ; ORBAN, 2008). L'équation générale est la suivante :

$$\frac{\partial (V_{\text{eff},i} \ C_i)}{\partial t} = \sum_{j=1}^n Q_{ij} \ C_{ij} + Q_i \ C'$$
⁽³⁾

où : $V_{eff,i}$ est le volume effectif de mélange du réservoir i; C_i est la concentration au sein du réservoir i; Q_{ij} est le flux échangé entre les réservoirs i et j (hydrauliquement connectés); C_{ij} est la concentration associée à l'échange de flux Q_{ij} et C' est la concentration injectée dans la cellule.

II.3.2.3 Gestion du pas de temps en transport

Avec le code SUFT3D, la résolution des équations de transport est généralement réalisée selon une approche Eulérienne décentrée. Ce type de résolution impose une sévère limitation du pas de temps. Le critère qui sera utilisé dans le cadre de cette étude est le nombre de Courant (cf. équation 4). Cet indicateur ne doit pas excéder la valeur de 1. Au-delà de cette valeur, cela signifierait que le soluté parcourt dans un pas de temps (Δt), une distance plus importante que la taille d'un élément (Δx). Ainsi, si le nombre de Courant est supérieur à 1, on s'expose à des problèmes de dispersion numérique ou à des problèmes de résolution causés par une oscillation excessive autour de la solution.

$$\mathbf{Cr} = (\mathbf{v}_{\mathbf{x}}^* \Delta \mathbf{t}) / \Delta \mathbf{x} \tag{4}$$

où : Cr est le nombre de Courant et $v_{\boldsymbol{x}}\,$ est la vitesse de d'advection du soluté.

II.3.3 Résolutions mathématiques

Au sein du code SUFT3D, la résolution mathématique des équations d'écoulement et de transport se fait par éléments finis. Cette technique permet de construire des maillages flexibles en faisant intervenir différents types d'éléments. Il est ainsi possible d'adapter plus facilement le maillage à la réalité géologique. Dans le modèle du bassin de la Dyle, ce sont des triangles

extrudés en prismes qui ont été utilisés. Ces éléments de forme prismatique ont la faculté d'épouser de manière relativement précise les contours géologiques.



Figure 3 : Elément prismatique en trois dimensions.

II.4 CONDITIONS AUX LIMITES

Les conditions frontières permettent de définir les interactions d'eau ou de soluté, entre la zone modélisée et les zones voisines ainsi qu'avec d'autres composantes du cycle de l'eau. En subdivisant le maillage en vue de l'utilisation du code SUFT3D, il est indispensable de

générer des conditions aux limites de chaque sous-domaine. Ainsi, les conditions aux limites externes sont différenciées des conditions aux limites internes. Dans chacune de ces deux classes, on distingue trois types de conditions aux limites.

II.4.1 Condition de 1^{er} type ou de potentiel imposé (Dirichlet)

Sous sa forme *externe*, cette condition impose une charge constante à un nœud. Cette condition peut permettre de drainer ou d'alimenter l'aquifère. Ce sera l'exemple d'un gros fleuve relativement stable qui détermine le niveau de base de la zone modélisée.



Figure 4 : Exemple de condition de Dirichlet externe

La condition de Dirichlet *interne* permet d'imposer que la charge soit équivalente de part et d'autre d'un nœud dédoublé dans deux sous-domaines. La charge au niveau du nœud sur lequel est imposée cette condition reste ainsi une variable du modèle.



Figure 5 : Exemple de condition de Dirichlet interne

II.4.2 Condition de 2^{ème} type ou de flux imposé (Neumann)

La condition de second type impose un flux au travers d'une surface. Ce sera typiquement le cas d'une recharge ou d'une limite à flux nul. Qu'elle soit *interne* ou *externe*, l'utilisation de cette condition reste fondamentalement la même.



Figure 6 : Exemple de condition de Neumann

II.4.3 Condition de 3^{ème} type ou de flux dépendant d'une différence de potentiel (Fourier)

Sous sa forme *externe*, cette condition définit un flux qui varie en fonction d'une différence de potentiel selon un niveau de référence. Le flux échangé entre le modèle et l'extérieur peut être géré au travers d'un coefficient α . Par exemple, cette condition est utilisée pour modéliser les échanges entre nappe et rivière.



Figure 7 : Exemple de condition de Fourier externe

La condition de Fourier *interne* exprime un flux dépendant de la différence de potentiel existant entre deux nœuds dédoublés.



Figure 8 : Exemple de condition de Fourier interne

II.5 CALIBRATION DES MODELES HYDROGEOLOGIQUES

II.5.1 Principe

L'étape de calibration consiste à modifier les paramètres du modèle jusqu'à minimiser l'écart entre les valeurs observées et les valeurs simulées.

Dans le domaine de la calibration, deux grandes techniques peuvent être différenciées. La technique manuelle dite de « l'essai erreur » consiste à attribuer manuellement des valeurs aux différents paramètres pour atteindre une calibration satisfaisante. Il est ainsi possible de minimiser l'erreur en l'appréciant à l'aide d'un coefficient comme le R². L'autre méthode consiste à utiliser des algorithmes qui permettent de minimiser une fonction objectif de manière automatique. Cette méthode est également appelée modélisation inverse.

II.5.2 Etude statistique

La première étape de la phase de calibration consiste à étudier la sensibilité et la corrélation des différents paramètres. La sensibilité d'un paramètre permet de quantifier la modification de la fonction objectif que peut engendrer une variation du paramètre en question.

Le programme UCODE (POETER et al., 2005) permet d'étudier les différents paramètres du modèle avec les différents indicateurs cités ci-après :

le *composite scaled sensitivities* (c.s.s.) qui représente la sensibilité d'un paramètre par rapport à l'ensemble des points de référence (HILL, 1992 ; ANDERMAN and al., 1996 ; HILL and al., 1998). Plus la c.s.s. est élevée, plus le paramètre est sensible et donc plus celui-ci est susceptible de renfermer une information importante.

$$\mathbf{css}_{\mathbf{j}} = \left[\sum_{i=1}^{ND} (\mathbf{dss}_{ij})^2 |_{\underline{\mathbf{b}}} / \mathbf{ND} \right]^{\frac{1}{2}}$$
(5)

où : \underline{b} est jeu de paramètres ; ND est nombre de points d'observation.

 La *dimensionless scaled* sensitivities (d.s.s.) est utile pour calculer le c.s.s.. Elle représente la sensibilité d'un paramètre par rapport à un seul point d'observation (HILL, 1992 ; HILL and al., 1998).

$$\mathbf{dss}_{ij} = (\mathbf{\delta y'}_i / \mathbf{\delta b}_j)|_{\underline{\mathbf{b}}} |\mathbf{b}_j| \boldsymbol{\omega}_i^{\frac{1}{2}}$$
(6)

où : y' $_i$ est valeur simulée ; b $_j$ est paramètre estimé.

le parameter correlation coefficient (p.c.c.) permet de quantifier la corrélation entre deux paramètres j et k (HILL and TIEDEMAN, 2007). Plus le p.c.c. de deux paramètres est proche de 1, plus ils sont corrélés et évoluent dans le même sens. Plus le p.c.c. tend vers -1, plus les paramètres risquent de se compenser en évoluant dans des sens antagonistes.

$$\mathbf{pcc}(\mathbf{j},\mathbf{k}) = \mathbf{Cov}(\mathbf{j},\mathbf{k}) / (\mathbf{Var}(\mathbf{j})^{\frac{1}{2}} \cdot \mathbf{Var}(\mathbf{k})^{\frac{1}{2}})$$
(7)

 $o\hat{u}$: Cov(j,k) est covariance des paramètres j et k ; Var(j) est variance du paramètre j ; Var(k) est variance du paramètre k.

- Le *leverage* est un coefficient compris entre 0 et 1 qui globalise des informations de la d.s.s., c.s.s. et p.c.c.. Il permet de voir quelles observations fournissent le plus d'information sur un paramètre défini.

L'étude statistique peut aboutir à faire des choix de simplification des paramètres. Par exemple, il sera possible de fixer certains paramètres peu sensibles ou de regrouper des paramètres pour leur donner une plus forte sensibilité. Ces simplifications ont une nouvelle fois pour but de limiter le temps de calage puisque la durée du temps de calage est directement liée au nombre de paramètres (cf. équation 11, p. 15).

II.5.3 Optimisation

Les algorithmes de calage automatique sont implémentés dans un code de calcul qui cherche à minimiser une fonction objectif S(b) (HILL and TIEDEMAN, 2007).

$$\mathbf{S}(\mathbf{b}) = \sum_{i=1}^{ND+NPR} \omega_i [\mathbf{y}_i - \mathbf{y'}_i(\mathbf{b})]^2 = \sum_{i=1}^{ND+NPR} \omega_i \mathbf{e}_i^2$$
(8)

où : ω_i est le poids de la i^{ème} contribution ; ND est le nombre d'observations ; NPR est le nombre d'informations à priori ; b est un paramètre choisi ; y'_i est valeur simulée ; y_i est valeur observée ; e_i est i^{ème} résidu, (= [y_i - y'_i(b)]).

Avec ce type de fonction objectif, il est possible d'attribuer plus ou moins d'importance à une observation choisie par l'intermédiaire du facteur de pondération (ω_i). Par exemple dans le cas de deux types de mesures piézométriques, l'une dont le point de référence serait déterminé par interpolation sur une carte et l'autre dont le niveau de référence serait déterminé avec un D.G.P.S. (Differential Global Positioning System). La dernière de ces mesures devrait être plus fiable, c'est pourquoi elle se verrait attribuer un poids plus important.

Les études sur le poids des observations ont montré que celui-ci doit être proportionnel à l'inverse de la variance d'erreur sur les observations ($V_{(i)}$) (POETER and HILL, 1997 ; HILL and TIEDEMAN, 2007).

$$\omega_{\rm i} = 1/V_{\rm (i)} = 1/\sigma^2_{\rm (i)}$$
 (9)

où : σ est l'écart type

L'écart type est calculé à l'aide de la loi de Gauss selon l'équation 11.

$$\boldsymbol{\sigma} = (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})/\mathbf{u} \tag{10}$$

où : x est la valeur de référence ; μ est l'erreur estimée ; u est un paramètre de la loi de Gauss lié au niveau d'incertitude (ex : 95% d'erreur \rightarrow 1.96).

Les principaux codes utilisés pour le calage des modèles hydrogéologiques sont UCODE_2005 et PEST (POETER et al., 2005 ; DOHERTY, 2004). WILDEMEERSCH (2009) a mis en évidence que le code PEST est plus performant que le code UCODE_2005 pour l'optimisation mais qu'UCODE_2005 fournit directement des statistiques utiles pour l'étude de sensibilité des paramètres.

Le calage automatique est une opération relativement longue pouvant se compter en semaines voire en mois. Plus le maillage est simple en termes de géométrie et de nombre d'éléments, plus le calcul est rapide. Le temps de calage est une fonction linéaire du nombre de paramètres à caler.

$$\mathbf{t} = (\mathbf{t}_{ini} * \mathbf{n} + \mathbf{1}) * \mathbf{N.I.}$$
 (11)

où : t est le temps de calcul ; t_{ini} est le temps d'une simulation normale avec SUFT 3D ; n est le nombre de paramètres de calage ; N.I. est le nombre d'itérations pour parvenir à stabiliser la fonction objectif.

III - MODELISATION DU BASSIN HYDROGEOLOGIQUE DE LA DYLE

III.1 INTRODUCTION

La modélisation du bassin versant de la Dyle s'intègre dans le projet P.A.I. « *Pôle d'Attraction Interuniversitaire* » T.I.MO.T.HY. « *Tracing and Integrated MOdeling natural and anthropogenic effecTs on HYdrosystems : the Scheldt river basin an adjacent coastal North Sea* » (ANDRÉ et al., 2008). La Dyle est un cas d'étude éloquent et attrayant car ce bassin versant est occupé dans sa quasi-totalité par l'aquifère des sables bruxelliens. Cet aquifère s'étend bien au-delà des limites du bassin versant de la Dyle et représente à l'échelle nationale l'une des principales réserves d'eaux souterraines du pays. Malgré la prise de conscience de la présence d'une réserve d'eau conséquente, comme dans bien d'autres régions rurales, cet aquifère est touché par une pollution aux nitrates quasi omniprésente.

Il est donc nécessaire de donner aux acteurs de l'eau les outils nécessaires pour mieux comprendre les transferts d'eaux et de polluants au sein de cet aquifère et ainsi apprendre à le préserver. La compréhension de l'évolution qualitative et quantitative de ce stock d'eau souterraine passe par une modélisation de l'ensemble du bassin versant. Il a donc été proposé en dernière partie de ce rapport de simuler l'évolution de la contamination par les nitrates selon deux scénarios s'étendant jusqu'à l'horizon 2050.

III.2 PRESENTATION DE LA ZONE

III.2.1 Géographie du bassin de la Dyle

La zone étudiée se situe en Belgique entre Bruxelles et Namur. Le bassin versant considéré représente une superficie d'environ 437 km², comprise entre 42 et 145 m d'altitude. Les précipitations annuelles moyennes sur 30 ans sont de 792 à 829 mm réparties sur 228 à 234 jours (à Uccle, hors du bassin, Bruxelles). La lame d'eau évapotranspirée est de 549 à 552 mm par an sur la même période, (REGION WALLONNE, 2009), (Cf. Annexe 1, p. 53).



Figure 9 : Localisation de la zone d'étude en région wallonne belge (www2.ulg.ac.be/aemtc/a_Wallonie)

Le bassin versant est principalement occupé par l'activité agricole (cf. figure 10). Cette occupation du sol explique en partie les fortes concentrations en nitrates observées dans les eaux souterraines (Figure 14, p. 20).



III.2.2 Géologie du bassin de la Dyle

Figure 10 : Occupation du sol dans le bassin

Dyle-Gette (Région Wallonne, 2005)

Sur le plan structural, la zone étudiée est assez simple en ce qui concerne les formations Mézozoïque et Cénozoïque. En effet, elles se présentent sous forme tabulaire avec un léger pendage de 2 à 4° vers le NNW. Seules les formations du socle paléozoïque sont fortement tectonisées. Cela est dû au fait qu'elles se situaient au cœur du massif du Brabant, plissé et faillé durant la phase orogénique calédonienne, puis pénéplané (MATTE, 1986; MATTE, 2001; MANSY et LACQUEMENT, 2002; BOULVAIN et PINGOT, 2009).

La figure 11 présente une coupe du Sud du bassin de la Dyle orientée Est-Ouest. Le plan de localisation de cette coupe ainsi que trois coupes supplémentaires ont été placées dans l'annexe 2, p. 54.



Figure 11 : Coupe Est-Ouest de la vallée de la Dyle (Laurent E., 1978, « Coupe B » modifiée)

Le socle paléozoïque et précambrien est omniprésent en sous-couches ou à l'affleurement. Surmontant ces formations, se trouvent de bas en haut :

- les craies du Crétacé présentes dans le Nord du bassin ;
- les argiles thanétiennes et yprésiennes dans la partie Nord ;
 Ces deux dernières formations se terminent en biseau vers le Sud (eg. HERBOSCH et LEMONNE, 2000 ; DELCAMBRE et PINGOT, 2002 ; PINGOT et DELCAMBRE, 2006).
- la formation des sables éocènes dits « bruxelliens » ;
- les limons et alluvions quaternaires.

Ces deux dernières formations ne sont privées de leurs continuités latérales qu'au niveau des vallées dont les cours d'eau ont parfois creusé leurs lits jusqu'à faire apparaître le socle primaire (MONTEYNE, 1986).

Sur le plan hydrogéologique, l'aquifère principal de la région est celui des sables éocènes. Les principales caractéristiques hydrogéologiques des différentes formations sont reprises dans la figure suivante.

Ere	Système	Hydrogéologie et perméabilité	
CENOZOIQUE	Quaternaire	Aquifère limité des alluvions et de couverture, <i>10^{.8}</i> à 10 ^{.7} m/s	
	Paléogène	Aquifère des sables éocènes, <i>10³ à 10⁵</i> m/s	
		Aquiclude des argiles yprésiennes, 10 ⁸ à 10 ⁻⁹ m/s	
MESOZOÏQUE	Crétacé	Aquifère des craies du Brabant, $10^4 \text{ à } 10^5 \text{ m/s}$	
PALEOZOIQUE	Dévonien	Aquifère des calcaires dévono- carbonifères, <i>10⁻⁵</i> à 10 ⁻⁶ m/s	
	Silurien		
	Ordovicien		
	Cambrien	Aquifère local de fissures et d'altération du socie 10^6 à 10^7 m/c	
PRECAMBRIEN	Précambrien supérieur		

Figure 12 : Tableau de synthèse des principales caractéristiques hydrogéologiques des différentes formations (selon : De Maet, 1976 ; Ruthy, 2001 ; Ruthy, 2002 ; Habils, 2005 ; Rorive et Van Wittenberge, 2004 ; Monteyne, 1986 ; Gulinck et Loy, 1971 ; Gulinck et Marun, 1971).

III.3 PRINCIPAUX TYPES DE DONNEES

La réalisation d'un modèle à grande échelle est un travail nécessitant un volume important de données. Dans le cas de la Dyle, ce sont par exemple plus de 40 000 données piézométriques réparties sur plus de 500 ouvrages qui ont été utilisées. C'est pourquoi il est utile de récapituler et de classer ces données selon trois grands types.

III.3.1 Données géométriques permettant la construction du maillage

Ces données ont principalement été extraites de la *Banque de Données Hydrogéologiques* (B.D.Hydro.) et la banque de données *10-sous* de la région Wallonne.

En outre, de récents travaux de caractérisation de la piézométrie de l'aquifère des sables bruxelliens ont apporté une source d'information complémentaire et spatialisée (PEETERS et al, 2009). La technique utilisée par cet auteur est la méthode « Bayesian Data Fusion ». C'est une technique d'interpolation pondérée de la piézométrie prenant en compte les données de forage

existantes mais aussi d'autres sources d'informations secondaires telles que le réseau rivière ou la topographie.

En confrontant ces deux principales sources de données (banques de données et thèse PEETERS, 2010) il a été possible de vérifier la cohérence entre les deux ou d'établir des ajustements.

III.3.2 Données de sollicitations

Les autres données nécessaires aux calculs sont les données de sollicitations comprenant les prélèvements, la recharge en eau et les intrants en nitrates.

Les volumes prélevés ont été extraits de la B.D.Hydro. Il a été choisi de ne pas prendre en compte tous les captages de la zone d'étude car certains présentaient de trop faibles débits. Plus de 200 points de prélèvement ont été écartés car ils représentaient seulement 1% du volume prélevé sur le bassin. Les débits écartés étaient tous inférieurs à 9 600 m³/an. Seuls 49 points de prélèvement suffisent à représenter 99% du volume annuellement capté sur le bassin.

Dans le cadre de ce travail, pour les calculs de transport de nitrates proposés en dernière partie de ce rapport, il est proposé d'adopter un scénario simplifié de contamination par les nitrates, à l'instar des travaux d'ORBAN (2008) sur le bassin du Geer. Ce scénario d'évolution de la qualité des eaux souterraines a été proposé par des travaux antérieurs pour la période 1950-2000 (DAUTREBANDE et SOPHIER, 2004 et HERIVAUX et al., 2008). La contamination par les nitrates est considérée homogène sur le bassin. Cette hypothèse peut se justifier en première approche par le fait que près de 70% du territoire est occupé par une activité agricole provoquant une pollution diffuse presque omniprésente.

Initialement, une teneur en NO_3^- résiduelle de 10 mg/L dans les flux percolants vers la nappe est considérée jusqu'en 1950. Ensuite, la concentration est augmentée progressivement pour se stabiliser à 50 mg/L en 1985 jusqu'à nos jours (cf. figure 13).



L'une des principales innovations de ce projet consistera à utiliser ensuite les résultats d'une étude agronomique en terme de recharge et d'intrant en nitrates. Le modèle agronomique EPIC-GRID (SOHIER et al., 2009) permet de simuler l'effet de l'évaporation, l'influence du couvert végétal et les transferts dans la Z.N.S. de la nappe phréatique. Ainsi, la recharge de l'aquifère et l'intrant en nitrates sont fournis au niveau de la nappe avec une résolution de 1 km par 1 km. Les chroniques simulées s'étalent sur une période allant de 1970 à 2005. Elles prennent en compte les conditions météorologiques ainsi que les pratiques agricoles de l'époque.

Au stage actuel, les résultats de ce modèle sont utilisés dans le cadre de cette étude afin de définir une recharge spatialisée de la nappe. Cependant, les résultats d'intrants en nitrates ne sont pas encore utilisables tels quels par le code SUFT3D. C'est pourquoi il a été fait appel au scénario simplifié cité précédemment.

D'ores et déjà, la cartographie des résultats de cette étude agronomique permet de constater qu'une pollution relativement importante touche la zone d'étude avec des concentrations en nitrates simulées souvent supérieures à 50 mg/L (cf. Figure 14).



Figure 14 : Modélisation de la teneur en nitrates dans les eaux de recharge de la nappe pour la région wallonne belge (moyenne des valeurs calculées entre le 01/01/2000 et le 12/31/2005), (Sohier et al., 2009).

III.3.3 Données historiques utiles au calage

Les principales données ayant servi au calage sont des mesures de piézométrie et de concentration en nitrates extraites de la B.D.Hydro. Ces données sont extrêmement nombreuses comme souligné précédemment et étalées sur une période relativement longue. Pourtant, seuls quelques forages répartis équitablement sur le bassin et présentant à la fois des chroniques de données suffisamment longues ont pu être retenus pour la calibration du modèle. En effet, de nombreux ouvrages ont été suivis trop ponctuellement pour rendre leurs données exploitables.

Vingt et un points de calage ont été retenus pour la calibration des écoulements. Par contre seulement 8 points ont pu être utilisés pour calibrer le modèle en transport de nitrates. La période retenue pour la calibration des écoulements est de 1995 à 2000, tandis que pour le transport, la période de calibration s'étend de 1993 à 2008.

Les débits des cours d'eau constituent une information supplémentaire utile au calage du modèle. Ces données fournies par la *Direction Générale des Ressources Naturelles et de l'Environnement* (D.G.R.N.E.) au pas de temps journalier ont été traitées avec la méthode du V.C.N.3. Cette technique permet d'extraire les débits de base des cours d'eau au pas de temps mensuel et de connaître ainsi la contribution de la nappe au maintien du débit dans les rivières.

III.4 CHOIX CONCEPTUELS ET CONSTRUCTION DU MAILLAGE

III.4.1 Les choix conceptuels généraux

La définition du modèle conceptuel est une étape primordiale car les choix qui sont faits à ce niveau doivent permettre de mener le projet à son terme. Cette étape consiste à simplifier la réalité afin qu'elle devienne modélisable. Ces simplifications s'opèrent en fonction des données disponibles et selon le but de la modélisation.

III.4.1.1 Définition des limites du domaine

Des limites latérales à flux nul sont choisies pour les frontières correspondant aux limites du bassin versant hydrographique de la Dyle. En effet, dans cette région, les limites topographiques sont relativement proches des limites hydrogéologiques définies par la piézométrie (RUTHY, 2001 ; HABILS, 2005 ; RUTHY, 2002 ; RORIVE et VAN WITTENBERGE, 2004). Seul un tronçon de quelques kilomètres, sur la partie Est du modèle, faisant la frontière avec le bassin versant de la Gette a été considéré différemment. Des flux d'eau allant du bassin de la Gette vers le bassin de la Dyle ont été mis en évidence lors d'études précédentes (DASSARGUES et al., 2001). La zone de frontière en question a été donc modélisée de manière à permettre des échanges entre ces deux bassins.

L'étude géologique du bassin versant de la Dyle a permis de mettre en évidence la présence de deux aquifères, localement séparés par une formation aquiclude (DE MAET, 1976, RUTHY,

2001 ; HABILS, 2005 ; RUTHY, 2002 ; RORIVE et VAN WITTENBERGE, 2004 ; MONTEYNE 1986 ; GULINCK et LOY, 1971 ; GULINCK et MARUN, 1971).



Figure 15 : Choix conceptuels du modèle de la Dyle

Le système aquifère inférieur regroupe des formations anté-yprésiennes tandis que le système aquifère supérieur regroupe des formations post-yprésiennes. Ce premier est captif dans les zones où la formation argileuse thanétienne et yprésienne est présente. De plus, il est caractérisé par une plus faible perméabilité que l'aquifère supérieur. Ce dernier est composé par la formation des sables bruxelliens qui en font une formation hydrogéologiquement productive.

Au sein du modèle, la couche supérieure, représentant l'aquifère des sables bruxelliens, est limitée à la base, par le mur de la formation sableuse et à son sommet, par le niveau de piézométrie maximale de la nappe. Ce choix a permis l'intégration directe des résultats du modèle agronomique, sachant que celui-ci fournit la recharge et les intrants en nitrates à ce niveau.

Etant donné le manque d'information concernant les formations du socle et des craies, la couche inférieure a été considérée d'une épaisseur constante de 25 m en dessous de la couche supérieure. Cette épaisseur permet de représenter la frange d'altération du socle comme décrit dans les notices des cartes géologiques (PINGOT et DELCAMBRE, 2006 et DELCAMBRE et PINGOT, 2002).

Enfin, la formation des argiles yprésiennes a été prise en compte de manière implicite par l'intermédiaire d'une fonction de transfert. Ce choix se justifie par la faible connaissance de cette formation peu perméable, que ce soit au niveau de son extension latérale, de ses propriétés hydrogéologiques ou de son épaisseur. De cette manière, seul son caractère de barrière hydraulique est considéré. Cette prise en compte implicite des argiles présente également l'avantage de réduire considérablement le nombre d'éléments du modèle, diminuant ainsi les temps de calculs.

III.4.1.2 Prise en compte de l'hétérogénéité du domaine

L'utilisation d'un maillage éléments finis permet de représenter les formations géologiques de manière plus précise qu'un maillage différences finies. Malgré tout, il est impossible de représenter parfaitement l'ensemble des structures géologiques.

En accord avec le modèle conceptuel, le nombre de matériaux a été maintenu relativement limité par rapport à l'étendue de la zone modélisée. Il a été choisi de représenter seulement 10 matériaux différents (figure 19).

Les matériaux de la couche inférieure ont été distribués selon 3 faciès : les schistes fissurés et fracturés du massif du Brabant, les calcaires dévono-carbonifères et les craies du Crétacé.

La couche supérieure a été divisée en 7 matériaux. Quatre faciès ont été distingués pour représenter la formation des sables bruxelliens selon la description d'HOUTHUYS, (1990). Cette zonation est relativement grossière mais elle permet de prendre en compte les quatre principaux faciès rencontrés sur la zone modélisée et de leur attribuer des propriétés hydrogéologiques différentes (cf. figure 16).

Les plaines alluviales sont des zones où la géologie est particulièrement complexe à représenter car les formations y sont diversifiées. Ainsi, ces zones ont été modélisées par trois matériaux équivalents représentant chacun un mélange entre les formations présentes : alluvions, argiles ou socle et sable (cf. figure 17, p. 24). Ces matériaux équivalents se voient donc attribuer des propriétés de valeurs intermédiaires entre deux matériaux les concernés coefficients (perméabilités, d'emmagasinements spécifiques ou encore porosité).

Figure 16 : Les différents faciès sableux (Houthuys, 1990).



III.4.1.3. Les équations utilisées

Comme décrit précédemment, l'équation d'écoulement utilisée dans le cadre de ce travail est celle de Richards couplée avec des lois linéaires d'évolution des propriétés des matériaux dans la zone non saturée. Ces lois ont été utilisées car elles nécessitent relativement peu de paramètres et elles engendrent des temps de calculs relativement réduits.

L'équation de transport considérée, pour les simulations dont les résultats sont présentés ciaprès, est l'équation de type « mixing-cells » (cf. équation 3). L'utilisation de cette équation simplificatrice se justifie pour plusieurs raisons. Principalement, le problème récurant du manque de données pour pouvoir paramétrer le modèle (coefficients de dispersivités longitudinale et transversale, coefficient de diffusion moléculaire effective). En effet, il semble inutile d'utiliser une équation complexe engendrant des temps de calculs relativement longs si l'on n'a pas d'information pour la paramétrer. De plus, la pollution par les nitrates est une pollution diffuse. Par ailleurs, il a précédemment été précisé que dans le cas de pollutions diffuses, la dispersion hydrodynamique dans l'aquifère peut être dans un premier temps négligée par rapport au caractère diffus des sources de contamination. Par conséquent, il peut être toléré d'utiliser l'équation de transport *mixing cells* (ORBAN, 2008).

En optant pour cette modélisation simplifiée du transport de soluté, les temps de calculs sont assez réduits, (10 à 20 h pour la Dyle). Cela a permis de procéder à une calibration automatique des valeurs des différentes porosités de transport alors que cela aurait été rendu impossible par des temps de calculs trop longs avec l'équation d'advection-dispersion.

III.4.2 Génération du maillage

Une nouvelle technique de génération du maillage a été testée dans cette étude. Classiquement, le maillage est généré de manière automatique sur la base des contours géologiques. De cette manière, le maillage généré présente des éléments distordus dans les zones géologiquement complexes, ce qui peut rallonger considérablement les temps de calculs, voire empêcher la convergence. De plus, les points d'observations ou de prélèvements peuvent se situer au centre d'une maille à plusieurs centaines de mètres d'un nœud ou au contraire à quelques mètres, créant ainsi une source d'imprécision supplémentaire.



proposée



La méthode proposée consiste à intégrer non seulement les contours de la géologie mais aussi la position des différents points de pompage et d'observation du bassin. Cette construction peut impliquer la prise en compte de matériaux équivalents afin de représenter des zones géologiquement complexes telles que les fonds de vallées (cf. partie III.4.1.2, p 23). Cette approximation peut être acceptée du fait qu'elle concerne un modèle à grande échelle. En effet, il est constaté ci-après que cette erreur reste négligeable vis-à-vis du gain de précision apporté par la qualité de la convergence et le positionnement exact des points de référence. Dans le cadre de cette étude, la construction du maillage s'est faite par positionnement manuel de chaque nœud pour un niveau de référence. Les deux autres niveaux ayant été de simples copies pour lesquels les cotes et les matériaux assignés sont différents.

Comparaison des deux méthodes :

Les méthodes de construction du maillage ont été comparées sur le modèle de la Dyle. Les deux modèles ont été calés à l'aide du logiciel UCODE_2005. Cette calibration automatique permet d'obtenir un calage de précision équivalente pour les deux modèles. De plus, les valeurs initiales des paramètres ont été les mêmes afin de ne pas influencer la calibration.



Figure 18 : Comparaison des maillages

En comparant les coefficients R² de chacune des simulations, on constate que la nouvelle méthode proposée apporte une nette amélioration. En contrepartie de ce gain de précision, le nouveau maillage proposé a présenté un temps de calcul légèrement plus long durant les tests. Cette différence s'explique par le fait que ce dernier maillage compte près de 1 000 nœuds supplémentaires.

Un point n'a pas pu être parfaitement mis en évidence lors de cette comparaison. C'est la qualité de la convergence. Les deux maillages ont seulement été comparés en régime permanent, pourtant une diminution du nombre d'itérations a déjà pu être constatée. Cependant,

lorsque les simulations sont faites en régime transitoire ou en transport, il est beaucoup plus probable de rencontrer des problèmes de convergence. Les maillages géométriquement irréguliers peuvent avoir des difficultés à converger dans des cas plus complexes.

C'est le maillage construit selon la nouvelle méthode qui a été retenu pour la suite des calculs. Il est à noter que celui-ci n'a rencontré aucun problème de convergence lié à la géométrie des éléments.

Une fois terminé sous G.M.S.®, le maillage initial du modèle de la Dyle compte 12 750 éléments pour 9933 nœuds.



Figure 19 : Vision 3D du maillage avec exagération verticale de 50 fois.

III.4.3 Définition des sous-domaines

Les opérations de découpage du maillage s'effectuent dans l'interface MESHDIV du code SUFT3D (ORBAN, 2008).

III.4.3.1 Découpage horizontal

Le premier découpage entrepris est le découpage dit horizontal. Il a été utilisé pour séparer le domaine en trois sous-bassins et différencier les zones où la formation argileuse sépare les deux aquifères de celles où elle n'existe pas (cf. figure 20). De cette manière, 11 sous-domaines ont été créés. La connexion entre ces sous-domaines est assurée par une condition interne de 1^{er} type (Dirichlet) qui impose que la charge piézométrique soit la même pour chaque nœud dédoublé, (cf. partie II.4.1, p. 11). De ce fait, les sous-domaines créés n'ont aucune influence sur les écoulements au sein du bassin.



Figure 20 : Découpage horizontal en sous-domaines.

Si le découpage horizontal selon la couverture argileuse permet simplement de répondre aux exigences géologiques, le découpage en sous-bassins a un caractère plus innovateur propre à la modélisation à grande échelle. Ce découpage n'est pas laissé au hasard. Les sous-domaines sont définis pour des sous-bassins versants dont les débits aux exutoires sont connus. Les débits de base des cours d'eau ont été calculés de manière à pouvoir connaître la contribution de l'aquifère au maintien du débit dans les cours d'eau. La connaissance du flux d'eau sortant du sous-domaine vient apporter une précision supplémentaire pour la calibration du modèle.

III.4.3.2 Découpage vertical

Comme il a été précisé dans le modèle conceptuel, la formation argileuse thanétienne et yprésienne a été représentée de manière implicite par une fonction de transfert. Pour pouvoir représenter les argiles de cette manière, il a été nécessaire de découper verticalement le maillage afin de séparer les deux formations aquifères.



Figure 21 : Découpage vertical du maillage et représentation implicite d'une formation.

Une fois les deux aquifères séparés, ils sont reconnectés par une fonction de transfert de type condition de Fourier interne (cf. figure 21). Cette fonction de transfert est ajustée au travers d'un coefficient de conductance « α » qui varie selon l'épaisseur et la conductivité hydraulique de la formation (cf. équation 12).

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{SDi} \cdot \mathbf{SDj}} = \boldsymbol{\alpha} * \mathbf{A} * \Delta \mathbf{h}$$
(12)

où : $Q_{SDi-SDj}$ est le flux échangé entre deux sous-domaines SDi et SDj ; α est le coefficient d'échange (ou de perméabilité) ; A est la surface considérée ; Δ h est la différence de charge entre les deux sous-domaines.

III.4.4 Conditions aux limites

En travaillant avec le code SUFT3D et en créant des sous-domaines, deux types de conditions aux limites doivent être différenciées, celles aux limites internes et celles aux limites externes.



Figure 22 : Exemple de découpage du sous-domaine du Train et conditions aux limites en 3D

III.4.4.1 Conditions aux limites externes

La recharge s'applique sur l'ensemble des faces supérieures du modèle par une condition de type Neumann. Dans les calculs qui suivent, la recharge est attribuée de manière spatialisée grâce aux données fournies par le modèle agronomique (SOHIER and al., 2009). Les intrants de nitrates considérés pour les calculs présentés dans la dernière partie suivent le scénario simplifié proposé précédemment (cf. figure 13, p. 19).

Des conditions de flux nuls ont été définies par défaut sur la quasi-totalité du pourtour du maillage ainsi que sur ses faces inférieures. Cela se justifie par le fait que la limite du modèle respecte la limite de partage des eaux souterraines et que les formations inférieures à la zone modélisée sont très peu perméables.

Seul un tronçon de frontière avec le bassin de la Gette sur la partie Est du bassin a été traité différemment. Sur ce dernier, une condition de Fourier a été déterminée afin de pouvoir représenter des échanges d'eau entre les deux bassins versants.

Les interactions entre la nappe phréatique et les cours d'eau sont régies par des conditions de Fourier. Ce type de condition permet de simuler une évacuation de l'eau de la nappe vers la rivière lorsque le niveau d'eau est le plus haut dans la nappe. A l'inverse, elle permet de représenter une réalimentation de la nappe par le cours d'eau lorsque le niveau de la rivière est plus bas que celui de la nappe. A l'instar du scénario étudié dans le projet *Synclin'EAU* en cours, la concentration des flux de nitrates allant de la rivière vers la nappe ont été progressivement évolutifs de 10 à 25 mg/L entre 1950 et 1985. La concentration en nitrate dans les eaux de surface reste plus faible que celle des eaux souterraines. Ce phénomène est lié à l'effet de dilution par des eaux de ruissellement peu chargées et à différents processus de dégradation naturelle des nitrates en surface et dans les berges.

III.4.4.2 Conditions aux limites internes

Ce second type de condition est spécifique à la modélisation avec le code SUFT3D. Les conditions aux limites internes permettent de régir les échanges entre sous-domaines.

Les connexions verticales sont modélisées par des conditions de Fourier internes de manière à représenter les argiles selon la zonation définie lors du découpage du maillage. Les sousdomaines sont connectés horizontalement par des conditions de Dirichlet internes qui assurent le maintien d'un niveau d'eau équivalent pour un même nœud dédoublé dans deux sousdomaines (Figure 5, p. 11).

III.5 CALIBRATION DU MODELE EN ECOULEMENT PERMANENT

L'utilisation d'algorithmes de calage automatiques doit être précédée par une courte phase de calage manuel. Cette opération permet de déterminer des valeurs de départ plausibles afin que l'algorithme parvienne à converger.

La calibration d'un modèle à grande échelle est une étape qui pourrait se révéler extrêmement longue si l'on cherchait à optimiser l'ensemble des paramètres du modèle. C'est pourquoi, une première phase d'étude de sensibilité du modèle aux différents paramètres est nécessaire afin de sélectionner les paramètres ayant le plus d'importance. La deuxième phase consiste à optimiser les paramètres obtenus.

III.5.1 Etude de sensibilité des paramètres avec UCODE

Cette étape préliminaire est indispensable car le temps d'optimisation est directement lié au nombre de paramètres que l'on cherche à optimiser (cf. Équation 11).

Une étude de sensibilité est menée sur les paramètres suspectés d'être les plus sensibles avec le logiciel UCODE_2005[®].

Matériaux	C.S.S.
K 1 – socle	7,51.10 ⁻⁰²
K 2 – craie	1,79.10 ⁺⁰⁰
K 3 – calcaire	2,59.10 ⁻⁰²
K 4 – Sable quartzeux	7,49.10 ⁺⁰⁰
K 5 – Mélange argiles-alluvions	1,87.10 ⁻⁰¹
K 6 – Mélange socle-alluvions	2,39.10 ⁺⁰⁰
K 7 – Mélange socle-sable-alluvions	2,71.10 ⁻⁰¹
K 8 – Sable transition 2	1,56.10 ⁺⁰⁰
K 9 – Sable transition 1	1,95.10 ⁺⁰⁰
K 10 – Sable fin calcareux	6,86.10 ⁻⁰¹
Coefficient d'échange Dyle-Gette	1,17.10 ⁻⁰²
Coefficient de connexion verticale avec argiles	2,15.10 ⁻⁰²
Coefficient de connexion verticale sans argiles	2,08.10 ⁻⁰²

Figure 23 : Résultat de l'étude de sensibilité avec UCODE en régime permanent.

Le c.s.s permet d'estimer la sensibilité du modèle par rapport à un paramètre (cf. partie II.5.2, p. 13). Les paramètres peu sensibles sont simplement fixés à une valeur plausible sur la base de données hydrogéologiques de la littérature. En pratique les paramètres fixés seront ceux qui présentent un c.s.s. inférieur à 1.10^{-1} (HILL and TIEDEMAN, 2007).

Dans le tableau ci-dessus, les perméabilités du socle et des calcaires carbonifères sont peu sensibles. De ce fait ces paramètres ont été fixés selon les valeurs que l'on peut trouver dans la littérature (RUTHY, 2001 ; HABILS, 2005 ; RUTHY, 2002) : 1.10^{-6} m/s.

De même, il a été mis en évidence que les coefficients d'échange des conditions de Fourier qui régissent les échanges entre le bassin de la Dyle et de la Gette sont très peu sensibles. Leurs valeurs ont été fixées à 1.10^{-3} .

Le coefficient qui régit les connexions verticales entre les sous-domaines est également un paramètre peu sensible. Il a été choisi d'imposer une valeur de 1.10^{-3} pour les zones dépourvues d'argiles et de 1.10^{-10} pour les zones avec argiles.

L'étude de sensibilité a permis de déterminer qu'il serait utile d'optimiser 8 paramètres.

III.5.2 Optimisation des paramètres avec PEST

Le logiciel UCODE est capable d'optimiser les valeurs paramètres mais pour cette tâche, il se révèle moins performant que PEST. Ce dernier propose un certain nombre d'options numériques qui permettent de faciliter la convergence des calculs.

L'optimisation doit être relancée à plusieurs reprises avec des conditions initiales différentes car le code pourrait n'avoir trouvé qu'un minimum local de la fonction objectif.



Figure 24 : Schématisation du principe de l'optimisation des paramètres.

Une pondération est attribuée selon la qualité supposée de la mesure. Ainsi, une variance d'erreur de 2,16 a été fixée pour les mesures de débit tandis que la variance d'erreur des mesures piézométriques a été fixée à 1,3 de façon similaire à ce qui est fait dans le projet de modélisation de la Haine (en cours). La détermination de ces variances d'erreur permet d'attribuer automatiquement un poids plus faible aux mesures de débit des cours d'eau par rapport aux mesures de piézométrie. En effet, une plus forte incertitude pèse sur les mesures de

débit. Cependant, ce sujet prête actuellement à discussion entre spécialistes. Même s'il est vrai que statistiquement, l'incertitude liée à une mesure de piézométrie est plus faible, certains auteurs rappellent que la mesure de débit fournit une information plus représentative de l'ensemble du bassin et devrait donc au contraire obtenir un poids plus important.

III.5.3 Résultats de la calibration sur le modèle de la Dyle

La méthodologie présentée dans le paragraphe précédent est actuellement possible à mettre en œuvre lorsque l'on travaille en écoulement permanent. La durée d'une optimisation pour un modèle de quelques centaines de kilomètres carrés en régime permanent s'élève à quelques jours de temps de calcul. Si l'on souhaite appliquer cette méthodologie en écoulement transitoire, il faut actuellement compter en semaines, voire en mois avec les moyens informatiques disponibles.

L'optimisation du modèle de la Dyle s'est révélée être relativement plus rapide que pour les autres modèles à grande échelle réalisés précédemment par l'équipe d'Hydrogéologie de l'Université de Liège. La station de calcul utilisée possède un processeur Duo Core de 3.01GHz. En régime permanent, l'optimisation de huit paramètres a été accomplie en une demi-journée environ, selon les valeurs initiales choisies. Une comparaison des hauteurs d'eaux calculées et simulées est proposée à la figure 26.

Les valeurs retenues au terme de l'optimisation en régime permanent pour les variables évoquées précédemment sont présentées dans la figure 25.

Matériaux	K (m/s)	Mode de détermination
K 1 - socle	1,00.10 ⁻⁰⁶	Fixé
K 2 - craie	7,67.10 ⁻⁰⁵	Optimisé
K 3 - calcaire	1,00.10 ⁻⁰⁶	Fixé
K 4 - Sable quartzeux	5,13.10 ⁻⁰⁴	Optimisé
K 5 - Mélange argiles-alluvions	2,29.10 ⁻⁰⁴	Optimisé
K 6 - Mélange socle-alluvions	6,26.10 ⁻⁰⁵	Optimisé
K 7 - Mélange socle-sable-alluvions	1,00.10 ⁻⁰⁵	Optimisé
K 8 - Sable transition 2	2,90.10 ⁻⁰⁵	Optimisé
K 9 - Sable transition 1	4,92.10 ⁻⁰⁴	Optimisé
K 10 - Sable fin calcareux	1,00.10 ⁻⁰³	Optimisé
Coefficient d'échange Dyle-Gette	1,00.10 ⁻⁰³	Fixé
Coefficient de connexion verticale avec argiles	1,00.10 ⁻¹⁰	Fixé
Coefficient de connexion verticale sans argiles	1,00.10 ⁻⁰³	Fixé

Figure 25 : Valeurs optimisées et fixées des principales variables du modèle.

En analysant la figure 26 plus précisément, il en ressort qu'en certains points, les valeurs calculées diffèrent de plus de 10 m par rapport aux valeurs observées. C'est en replaçant chacun de ces points dans leur contexte géographique et géologie que l'erreur peut s'expliquer.

A l'heure actuelle, il n'a pas été possible d'apporter au cas par cas les modifications nécessaires à la résolution des différents problèmes. Les modifications possibles pourraient s'orienter vers un redécoupage plus fin des faciès sableux, un ajustement de la condition de Fourier externe qui régit les échanges entre la Dyle et la Gette ou encore vers des recherches plus poussées sur la cartographie de la formation argileuse.



Figure 26 : Ajustement entre valeurs observées et valeurs simulées en écoulement permanent.

Malgré ces erreurs locales, il est possible de constater sur la figure 27 que la géométrie de la carte piézométrique simulée est relativement proche de celle dressée par interpolation *Bayesian Data Fusion* sur base de mesures.



Figure 27 : Cartographie des champs de piézométrie simulés à gauche et cartographie basée sur les mesures et l'interpolation Bayesian Data Fusion (Peeters, 2010).

III.6 CALIBRATION DU MODELE EN TRANSPORT

III.6.1 Hypothèses spécifiques au calcul du transport de nitrates

III.6.1.1 Modification du maillage

Il est à noter que les simulations proposées par la suite ont été faites avec un maillage provisoirement modifié. L'utilisation de ce maillage se justifie par l'impossibilité actuelle d'exploiter les données d'intrants en nitrates du modèle agronomique. Pour cela les interfaces de préparation au code SUFT3D seront développées dans les semaines à venir.

Le sommet du maillage présenté précédemment a donc été surélevé au niveau du M.N.T. au lieu du niveau de piézométrie maximale. Ainsi, il a été possible d'appliquer des scénarios simplifiés (DAUTREBANDE et SOPHIER, 2004 et HERIVAUX et al., 2008) donnés au niveau de la surface.

III.6.1.2 Modèle de transport

Afin de parvenir à des temps de calculs raisonnables et de pouvoir procéder à une calibration automatique des paramètres de transport, il est proposé ici de simuler le transport de nitrates, sur la base d'un écoulement permanent. Cette hypothèse est bien sûr simplificatrice puisqu'il a été montré que la concentration en nitrates varie en fonction des saisons (ORBAN, 2008). Ainsi, lors des calculs présentés ci-après, le modèle d'écoulement est permanent tandis que le modèle de transport est transitoire.



Figure 28 : Comparaison de l'évolution des concentrations en nitrates en fonction des variations de niveaux d'eau dans le piézomètre de Viemme, Belgique (Orban, 2008).

III.6.1.3 Le phénomène de dénitrification

La dénitrification est un phénomène de dégradation naturel qui se produit dans les milieux réducteurs comme les nappes captives (cf. équation 7).

$$NO_3^{-} \rightarrow NO_2^{-} \rightarrow NO^{-} \rightarrow N_2O \rightarrow N_2$$
(7)

Dans la zone étudiée, ce type de dégradation est constaté dans l'aquifère captif des craies selon les analyses chimiques extraites de la B.D.Hydro. Cependant, le code SUFT3D ne permet pas encore de prendre en compte ce phénomène de façon hétérogène dans le domaine modélisé. La propriété de dégradation est associée au soluté. Ainsi, le phénomène s'applique à l'ensemble du domaine. Au vu de ce problème, les résultats qui seront présentés dans la suite de ce rapport ne concerneront que la couche supérieure du modèle. Le logiciel sera modifié dans un avenir proche afin de pouvoir associer le déclenchement du phénomène de dégradation à un changement de matériaux.

III.6.2 Optimisation des paramètres de transport

Durant cette étape, les 60 ans de simulation ont été divisés en 4380 pas de temps de 5 jours. Le nombre de Courant est resté compris dans l'intervalle de $7,12.10^{-4}$ à $3,38.10^{-4}$, c'est-à-dire largement en dessous de la valeur critique de 1.

A l'heure de la rédaction de ce rapport seules quatre valeurs de porosité de transport ont pu être optimisées pour des raisons de temps de calculs. L'optimisation de ces quatre paramètres a duré environ 5 jours selon les valeurs initiales choisies.

Matériaux	Porosité de transport en %
Sable quartzeux et sable de transition 2	6
Sable fin et sable de transition 1	5.08
Mélange argile-alluvions	3
Mélange socle-alluvions et mélange socle- alluvions-sable	0.5

Figure 29 : Valeurs optimisées des porosités de transport.

Le jeu de données ayant permis cette optimisation compte 100 mesures réparties sur 8 ouvrages exclusivement implantés dans la formation des sables bruxelliens.

III.6.3 Résultats de la calibration sur le modèle de la Dyle

Les 8 graphiques qui suivent présentent la différence qu'il peut y avoir entre valeurs simulées et valeurs observées.



Figure 30 : Evolution de la concentration en nitrates au niveau des points de calage : U-16095 ; U-16100 ; F-11688 et F-11701.



Figure 31: Evolution de la concentration en nitrates au niveau des points de calage : F-5797 ; F-5787 ; F-5772 et F-5769.

Les résultats de cette calibration peuvent être considérés comme acceptables à ce stade car ils reproduisent la tendance observée de l'évolution des concentrations en nitrates. Cependant, en certains points une erreur systématique de surévaluation de la teneur en nitrates est à noter. En replaçant ces points dans leur contexte géographique, il est possible d'expliquer la différence entre valeurs calculées et valeurs observées. En effet, il apparaît sur la figure 32, présentant l'occupation du territoire, que les points pour lesquels l'écart est important (F-5769 et F-11688) se trouvent tous à l'intérieur ou à proximité de zones naturelles. Il est logique de penser que dans les zones naturelles les intrants en nitrates seront inférieurs aux valeurs moyennes et homogènes prises en considération par le modèle. Ce dernier vise essentiellement à simuler l'évolution régionale en tenant compte essentiellement de l'aspect agricole des activités.

Au vu de ces résultats, il apparaît donc qu'il sera nécessaire d'utiliser les données de l'intrant en nitrates spatialisé du modèle agronomique EPIC-GRID (SOHIER et al., 2009), afin d'apporter une précision supplémentaire à la modélisation du transport de nitrates, en prenant en compte l'hétérogénéité de l'intrant.



Figure 32 : Carte simplifié d'occupation du sol (selon MEYUS et al., 2004)

IV - SIMULATION DU TRANSPORT DE NITRATES POUR DIFFERENTS SCENARIOS

Dans les paragraphes qui suivent, plusieurs scénarios simplifiés seront proposés. Ces simulations permettent de dévoiler les capacités du modèle développé.

IV.1 PRESENTATION DES SCENARIOS A L'HORIZON 2050

A partir de 2010, deux principaux scénarios d'évolution de la concentration des intrants en nitrates seront proposés (cf. figure 33).

- *Premier scénario* : la concentration chute à 10 mg/L entre 2010 et 2011, afin de simuler un retour au signal de base.
- Second scénario : la concentration chute à 40 mg/L entre 2010 et 2011.

Même si ces différents scénarios sont extrémistes et peu réalistes du fait de la brutalité des changements, ils mettent en évidence la dynamique de la nappe des sables bruxelliens. Ces deux scénarios permettent de déterminer le nombre d'années nécessaires afin que la concentration en nitrates retombe à 40 mg/L pour ainsi laisser une marge de sécurité de 10 mg/L par rapport à la norme de potabilité.



Figure 33 : Scénarios simplifiés de l'évolution de la concentration en NO3- dans les eaux de recharge de la nappe.

IV.2 RESULTATS DES SIMULATIONS

Dans la zone modélisée un effet de dilution de la pollution en nitrates est observé dans les zones où la nappe est réalimentée par le réseau rivière (cf. figure 34 et 35). En effet, il est possible de constater dans les vallées un certain nombre de zones où la concentration en nitrates est moindre.

Au contraire, d'autres zones des plaines alluviales sont plus rapidement touchées par la contamination. Cela s'explique par la moindre épaisseur de la Z.N.S. qui engendre une contamination plus rapide de l'aquifère superficiel (cf. figure 34). A l'inverse, dans la phase de réhabilitation de la nappe, ce sont ces mêmes zones qui retrouvent le plus rapidement des teneurs en nitrates proches du signal de base (cf. figure 35).



Figure 34 : Cartographie évolutive de teneur en nitrates simulée dans les eaux souterraines entre 1990 et 2010, selon le scénario 1.



Figure 35 : Cartographie évolutive de teneur en nitrates simulée dans les eaux souterraines entre 1990 et 2010, selon le scénario 1.

La figure 36, permet de cerner la dynamique de l'aquifère des sables bruxelliens sous l'effet d'un changement radical de la qualité de l'intrant en nitrates. Malgré le caractère extrêmement positif du scénario 1, il faudrait compter près de 20 ans avant que la concentration en nitrates globale de l'eau des points de calage n'ait diminué de moitié.



Figure 36 : Graphique d'évolution de la teneur en nitrates simulée dans les 8 ouvrages de référence de 1950 à 2050, selon le scénario1.

Le scénario 2 est certainement plus proche des changements réels de pratiques agricoles qui peuvent être attendus dans les années à venir. La figure 37 (page suivante) montre qu'il faudrait attendre 5 ans avant que l'ensemble des points d'observation choisis redescendent à moins de 40 mg/L en nitrates.



Figure 37 : Graphique d'évolution de la teneur en nitrates simulée dans les 8 ouvrages de référence de 1950 à 2050, selon le scénario 2.

Les deux scénarios présentés dans les figures 36 et 37 mettent en évidence que la dynamique de cet aquifère est relativement lente. C'est pourquoi, dans le contexte législatif actuel de la D.C.E., il sera utile aux différents états membres de mettre en place des modèles hydrogéologiques à échelle régionale afin de pouvoir démontrer à la CE le caractère lent de l'amélioration de la qualité des eaux souterraines même en prenant des mesures drastiques en la matière.

V – CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Ce travail fait partie d'un projet de recherche appliquée qui sera certainement étendu à une majeure partie du territoire belge dans les années à venir afin de répondre aux exigences imposées par la D.C.E.. Dans ce cadre législatif, les modèles hydrogéologiques à grande échelle deviendront des outils incontournables d'aide à la prise de décisions pour la gestion quantitative et qualitative des masses d'eau souterraine.

Le modèle de la Dyle n'est actuellement pas terminé. De nombreux points sont encore à améliorer pour optimiser sa fiabilité et le rendre opérationnel. Cependant, la dernière partie de ce rapport a mis en évidence que ce modèle peut déjà être utilisé pour faire des simulations de tendances à long terme.

Comme attendu, le modèle de la Dyle nous a confrontés à de nouveaux problèmes liés à la réalité de terrain. Des travaux antérieurs ont permis d'y répondre partiellement. Cependant, de nouveaux choix et concepts ont été développés et testés au cours du stage pour parvenir à solutionner une partie des problèmes restant, principalement : la représentation implicite d'une formation argileuse mal connue et la réalisation d'un maillage à la fois suffisamment simple pour permettre de procéder à une calibration automatique du modèle de transport mais également capable d'exploiter les résultats du modèle agronomique EPIC-GRID.

Les principales avancées du projet au cours du stage ont été :

- la création d'un maillage prenant en compte les différents choix conceptuels,
- la calibration du modèle en écoulement permanent et en transport,
- le début de la calibration en écoulement transitoire,
- les premières simulations du transport de nitrates selon la méthode H.F.E.M.C.,
- les premiers résultats mettant en avant la grande inertie du système aquifère de la Dyle.

Dans la suite des travaux concernant ce bassin, l'équipe d'Hydrogéologie de l'Université de Liège privilégiera les opérations suivantes nécessaires à l'optimisation de l'outil :

- calibration du modèle en écoulement transitoire,
- implémentation au sein du code SUFT3D de la possibilité d'associer le déclenchement du phénomène de dégradation d'un soluté à un changement des matériaux,
- développement les interfaces du code afin de pouvoir intégrer les données d'intrants en nitrates spatialisés du modèle agronomique EPIC-GRID,

BIBLIOGRAPHIE

Publications:

ANDERMAN E.R., HILL M.C. and POETER E.P., 1996. Two-dimensional advective transport in ground-water flow parameter estimation, Ground Water, 74(2):212-218.

ANDRÉ L., ANZIL A., BAEYENS W., BILLEN G., BROUYERE S., BURTON S., CARDINAL D., CHOU L., COUTURIER J., DASSARGUES A., DE BRAUWERE A., DE BRYE B., DELEERSNIJDER E., DELHEZ E., ELSKENS M., GAO Y., GARNIER J., GOURGUE O., GYPENS N., HECQ W., KARNA T., LANCELOT C., MAGNIER A., MERCIER C., ORBAN P., OUATTARA K., PASSERAT J., POLARD A., PLANCHON F., REBREANU L., ROEVROS N., ROUSSEAU V., SANCTORUM H., SERVAIS P., SILVESTRE M., THIEU V., VANHOUTTE-BRUNIER A., WILDEMEERSCH S., WHITE L. and WOLK F, 2008. Rapport PAI-TIMOTHY : Interuniversity Attraction Poles (IAP); Tracing and Integrated Modeling of Natural and Anthropogenic Effects on Hydrosystems: The Scheldt River Basin and Adjacent Coastal North Sea (TIMOTHY) 2008. Belgian science policy pp. 21 à 24.

BARRY D. A. and BAJRACHARYA K. 1993. Application of an improved mixing cell model to equilibrium and nonequilibium multispecies transport. University of western Australia.

BOULVAIN F. et PINGOT J-L., 2009. Introduction à la géologie de la Wallonie. Support de cours de géologie, Université de Liège (www2.ulg.ac.be).

BROUYERE S. 2009. Rapport de synthèse des travaux et résultats obtenus dans le cadre du projet FP6 AquaTerra et relatifs à l'étude hydrogéologique et la modélisation numérique écoulement – transport pour le site de l'ancienne cokerie de Flémalle (AT/0901), pp 40 à 59. Université de Liège.

BROUYERE S., ORBAN P., WILDEMEERSCH S., COUTURIER J., GARDIN N. et DASSARGUES A. 2009. The hybride finite element mixing cell method : a new flexible method for modeling mine water problems. Springer-Verlag.

BROUYERE S., 2001. Etude et modélisation du transport et du piégeage des solutés en milieu souterrain variablement saturé. Thèse : Université de Liège, 640 pp.

CARABIN G. and DASSARGUES A., 1999. Modelling groundwater with ocean and river interaction. Water Ressources Research 35 (8) : 2347-2358.

DASSARGUES A., BROUYERE S. et MONJOIE A. 2001. Integrated modelling of the hydrological cycle in relation to global climate change, rapport scientifique 2000, Services fédéraux belges des affaires Scientifiques, Techniques et Culturelles (SSTC).

DAUTREBANDE S. et SOPHIER C., 2004. Projet de recherche PIRENE, Rapport final. Université de Gembloux, 120 p.

DOHERTY J., 2004. PEST : Model-independant parameter estimation – User manual : 5th edition, Watermark Numerical computing.

DE MAET., 1976. Etude hydrogéologique du bassin de l'Houssière – Sous-bassin de la Dyle – Commune de Perwez-Brabant. Mémoire de fin d'études : Université catholique de Louvain.

GODERNIAUX P., 2010. Impact of Climat Change on Groundwater Reserves. Thèse : Université de Liège 189 p.

GULINCK M. et LOY W., 1971. Hydrogéologie du Crétacé du bassin de la Dyle (Brabant). Bull. Soc. Belge de géologie, pp. 77 à 83.

GULINCK M. et MARUN V., 1971. Reconnaissance hydrogéologique du Bruxellien du bassin de la Dyle en amont de Wavre. Service Géologique de Belgique.

HÉRIVAUX C., ORBAN P, BATTLE-AGUILAR J., BROUYÈRE S. and GODERNIAUX P., 2008. Socio-economic analysis integrating soil-water system modelling for the Geer catchment (Meuse, Walloon region) – diffuse nitrate pollution in groundwater, FP6-IP, AquaTerra project (n°505428, 45 p.

HILL M.C., 1992. A computer program (MODFLOWP) for estimating parameters of a transient, three-dimensional, ground-water flow model using non-linear regression, U.S.G.S. open file report 91-184.

HILL M.C., COOLEY R.L.and POLLOCK D.W., 1998. A controlled experiment in ground-water flow model calibration using nonlinear regression, Ground Water, 36(3):520-535.

HILL M.C. and TIEDEMAN C.R., 2007. Effective groundwater model calibration : With analysis of data, sensitivities, predictions, and uncertainty, 1st edition, John Wiley & Sons, Inc., New Jersey, 480 pp.

HOUTHUYS, 1990. Vergellijkende studie van de afzettingsstructuur van getijdenzanden uit het Eoceen en van de huidige Vlaamse banken. Aardkundjige Mededelingen 5, p. 55-99.

LAURENT E., 1978. Monographie du bassin de la Dyle, partie I, II, III. Ministère de la santé publique et de l'environnement, 302 pp.

MANSY J-L. et LACQUEMENT F., 2002. Le Paléozoïque du Nord de la France et de la Belgique. Géologues, Rev. off. de l'Union française des Géologues, 133-134, 7-24.

MATTE P., 2001. The Variscan collage and orogeny (480-290 Ma) and the tectonic definition of the Armorica microplate. Terra Nova , 13, pp. 122-128.

MATTE P., 1986. La chaîne Varisque parmi les chaînes paléozoïques péri-atlantiques, modèle d'évolution et position des grands blocs continentaux au Permo-Carbonifère. Bull. Soc. Géol. France, 8ème série, II, pp. 9 à 24.

MEYUS Y., ADYNS D., WOLDEAMLAK S. T., BATELAAN O. and DE SMEDT F., 2004. Opbouwvan een Vlaams Grond-watervoedingsmodel : Eindrapport. Technical report, ANIMAL, afdeling Water, 81 p.

MONTEYNE R., 1986. Rapport final concernant l'étude structurale de la formation sableuse bruxellienne – Convention région Wallonne. Université Libre de Bruxelles : laboratoires associés de géologie-pétrologie-géochronologie.

ORBAN P., BROUYERE S., CORBEANU H. et DASSARGUES A., 2005. Large-scale groundwater flow and transport modelling: methodology and application to the Meuse Basin, Belgium. IAHS publ.

ORBAN P., 2008. Solute transport modeling at the groundwater body scale : nitrates trends assessment in the Geer basin(Belgium. Thesis : University of Liège, 207 p.

ORBAN P., BROUYÈRE S., WILDEMEERSCH S., COUTURIER J. et DASSARGUES A. 2008. The hybride finite element mixing cell method : a new flexible method for modeling mine water problems. Présentation : conference à San Francisco.

PEETERS L., FASBENDER D., BATELAAN O. and DASSARGUES A., 2009. Bayesian Data Fusion for water table interpolation : incorporating a hydrogeological conceptual model in kriging. Water Ressource Research.

PEETERS L., 2010. Groundwater and geochemical modelling of the unconfined Brussels aquifer, Belgium. Thesis : Kotholieke Universiteit Leuven

POETER E.P. and HILL C., 1997. Inverse models : a necessary next step in groundwater modelling, Ground Water, 35(2), pp. 250-260.

POETER E.P., C. HILL, BANTA E.R. and MEHL S.W., 2005. UCODE_2005 and six other computer codes for universal sensitivity analysis, calibration, and uncertainty evaluation, technical methods 6-a11,, United States Geological Survey, Reston, Virginia, USA, 283 p.

RORIVE A. et VAN WITTENBERGE F., 2004. Caractérisation et modélisation des nappes d'eau souterraines – projet PIRENE. Faculté polytechnique de Mons - Cellule hydrogéologie, p 40 à 48.

SOHIER C., DEGRÉ A. and DAUTREBANDE S., 2009. From root modelling to regional forecasting of nitrate concentration in recharge flows – The case of the Walloon Region (Belgium), Journal of hydrology 369, pp. 350-359.

REGION WALLONNE, 2009. Etat des nappes d'eau souterraine de la Wallonie. Direction générale opérationnelle, agriculture, ressources naturelles et environnement, (site : http://environnement.wallonie.be/de/eso/atlas), 22 p.

REGION WALLONNE, 2005. Etat des lieux des sous-bassins hydrographiques ; Tome I : Etat des lieux. Sous-bassin Dyle-Gette (Description générale des caractéristiques du sous-bassin). Région wallonne de Belgique, 50 p.

VAN GENUCHTEN M. T., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, Soil Sci. Soc. Am., 44, 892-898.

WILDEMEERSCH S., 2009. Rapport d'activité de deuxième année de doctorat, Université de Liège.

Cartes :

DELCAMBRE B. et PINGOT J-L., 2002. Carte géologique de Wallonie, Chastre - Gembloux, n° 40/5-6, Echelle 1/25 000. Ministère de la région wallonne : direction générale des ressources naturelles et de l'environnement.

HERBOSCH A. et LEMONNE E., 2000. Carte géologique de Wallonie, Nivelles - Genappe, n° 39/7-8, Echelle 1/25 000. Ministère de la région wallonne : direction générale des ressources naturelles et de l'environnement.

HABILS F., 2005. Carte hydrogéologique de Wallonie, Nivelles – Genappes, n° 39/7-8, Echelle 1/25 000. Ministère de la région wallonne : direction générale des ressources naturelles et de l'environnement.

PINGOT J-L.et DELCAMBRE B., 2006. Carte géologique de Wallonie, Perwez - Egherée, n° 40/7-8, Echelle 1/25 000. Ministère de la région wallonne : direction générale des ressources naturelles et de l'environnement. RUTHY I., 2002. Carte hydrogéologique de Wallonie, Wavre – Chaumont - Gistoux, n° 40/1-2, Echelle 1/25 000. Ministère de la région wallonne : direction générale des ressources naturelles et de l'environnement.

RUTHY I., 2001. Carte hydrogéologique de Wallonie, Chastre - Gembloux, n° 40/5-6, Echelle 1/25 000. Ministère de la région wallonne : direction générale des ressources naturelles et de l'environnement.

Sites Internet :

www2.ulg.ac.be/aemtc/a_Wallonie ; Les Intervenants Cliniques Certifiés (ICC) par l'AEMTC ; consulté le 02-11-09.

http://environnement.wallonie.be/directive_eau/cartes ; Etat des lieux du sous-bassin de la Dyle-Gette – Cartes ; consulté le 03-112009.

ANNEXES

ANNEXE 1 : Pluviométrie annuelle moyenne du bassin Dyle-Gette



Source : //environnement.wallonie.be/directive_eau/



ANNEXE 2 : Coupes du bassin de la Dyle à Wavre selon LAURENT E. (modifié)

TABLE DES ILLUSTRATIONS

Figure 1 : Modèles mathématiques d'écoulement et de transport dans le code SUFT 3D	7
Figure 2 : Schéma général du principe (André et al., 2008)	8
Figure 3 : Elément prismatique en trois dimensions	10
Figure 4 : Exemple de condition de Dirichlet externe	11
Figure 5 : Exemple de condition de Dirichlet interne	11
Figure 6 : Exemple de condition de Neumann	11
Figure 8 : Exemple de condition de Fourier interne	12
Figure 9 : Localisation de la zone d'étude en région wallonne belge	16
Figure 10 : Occupation du sol dans le bassin Dyle-Gette	17
Figure 11 : Coupe Est-Ouest de la vallée de la Dyle	17
Figure 12 : Tableau de synthèse des principales caractéristiques hydrogéologiques des	
différentes formations	18
Figure 13 : Scénarios simplifiés de l'évolution de la concentration en NO3- dans les flux	
d'eaux allant vers la nappe	19
Figure 14 : Modélisation de la teneur en nitrates dans les eaux de recharge de la nappe pour la	ì
région wallonne belge	20
Figure 15 : Choix conceptuels du modèle de la Dyle	22
Figure 16 : Les différents faciès sableux	23
Figure 17 : Deux façons de générer un maillage	24
Figure 18 : Comparaison des maillages	25
Figure 19 : Vision 3D du maillage avec exagération verticale de 50 fois	26
Figure 20 : Découpage horizontal en sous-domaines	27
Figure 21 : Découpage vertical du maillage et représentation implicite d'une formation	28
Figure 22 : Exemple de découpage du sous-domaine du Train et conditions aux limites en 3D	29
Figure 23 : Résultat de l'étude de sensibilité avec UCODE en régime permanent	31
Figure 24 : Schématisation du principe de l'optimisation des paramètres	32
Figure 25 : Valeurs optimisées et fixées des principales variables du modèle	33
Figure 26 : Ajustement entre valeurs observées et valeurs simulées en écoulement permanent	34
Figure 27 : Cartographie des champs de piézométrie simulés à gauche et cartographie basée s	ur
les mesures et l'interpolation Bayesian Data Fusion	34
Figure 28 : Comparaison de l'évolution des concentrations en nitrates en fonction des	
variations de niveaux d'eau dans le piézomètre de Viemme, Belgique	35
Figure 29 : Valeurs optimisées des porosités de transport	36
Figure 30 : Evolution de la concentration en nitrates au niveau des points de calage : U-16095	5;
U-16100 ; F-11688 et F-11701	37
Figure 31: Evolution de la concentration en nitrates au niveau des points de calage : F-5797 ;	F-
5787 ; F-5772 et F-5769	38
Figure 32 : Carte simplifié d'occupation du sol	39
Figure 33 : Scénarios simplifiés de l'évolution de la concentration en NO3- dans les eaux de	
recharge de la nappe	40
Figure 34 : Cartographie évolutive de teneur en nitrates simulée dans les eaux souterraines	
entre 1990 et 2010, selon le scénario 1.	41
Figure 35 : Cartographie évolutive de teneur en nitrates simulée dans les eaux souterraines	
entre 1990 et 2010, selon le scénario 1	42
Figure 36 : Graphique d'évolution de la teneur en nitrates simulée dans les 8 ouvrages de	
référence de 1950 à 2050, selon le scénario1	43
Figure 37 : Graphique d'évolution de la teneur en nitrates simulée dans les 8 ouvrages de	
référence de 1950 à 2050, selon le scénario 2	44

REMERCIEMENTS

Suite à la réalisation de ce travail, je tiens à remercier l'équipe de Liège qui m'a accueillit chaleureusement au sein du laboratoire. Je pense plus particulièrement à Julie C., Julie G, Ingrid, Samuel, Mathieu, Philippe et bien sûr Alain DASSARGUES qui m'ont particulièrement aidé afin de mener à bien ce projet.

Je tiens également à remercier Séverin PISTRE pour ses conseil et avoir accepté de faire le lien entre la France et la Belgique.

Je n'oublie pas non plus ma famille et mes proches que ce soit sur terre comme au ciel sans qui rien de tout ça ne serait arrivé.

RESUME

Il est reconnu que l'étude des milieux aquatiques doit se faire selon une approche intégrée dans le cycle de l'eau afin de prendre en compte un maximum de facteurs influents et parfois interdépendants. Les ressources en eaux souterraines doivent donc être étudiées de la sorte afin de répondre aux exigences fixées par la Directive Cadre Européenne sur l'Eau.

La modélisation hydrogéologique à l'échelle régionale peut amener à modéliser des zones importantes de plusieurs centaines de kilomètres carrés. Avec les connaissances et moyens technologiques actuels, il est impossible de les modéliser avec la même approche que celle des modélisations hydrogéologiques locales. Cette limite est principalement due au manque de données de manière générale et aux temps de calculs induits. Dans un tel contexte, il est nécessaire de simplifier la réalité et d'utiliser des techniques appropriées à ce type de modélisation. La phase de détermination des choix conceptuels devient alors une étape primordiale qui amène à prendre des décisions spécifiques à la modélisation à grande échelle. Le code SUFT3D (Satured and Unsatured Flow and Transport in 3D), utilisé pour la réalisation de ce travail, est développé par le Groupe d'Hydrogéologie de l'Université de Liège afin de devenir un outil particulièrement approprié à ce type de problématique. D'autre part, la phase de calibration d'un modèle à grande échelle peut être une étape longue et fastidieuse. Les logiciels spécialisés (UCODE_2005 et PEST) ont été utilisés pour accomplir cette tâche de manière automatique, rigoureuse et efficace.

L'étude de cas présentée est celle du bassin versant de la Dyle en Région Wallonne de Belgique. Ce bassin versant est largement occupé par la formation des sables bruxelliens connue pour son caractère aquifère. Malgré la prise de conscience de l'existence d'une réserve d'eau importante, cet aquifère est touché par une pollution diffuse aux nitrates. En fin de travail, ce dernier aspect est développé au travers de simulations du transport de nitrates s'étendant jusqu'en 2050.

Mots clés : modélisation grande échelle, milieu poreux, choix conceptuels, calibration automatique, éléments finis, mixing cells, transport de nitrates, sables bruxelliens.