



HAL
open science

Modélisation mécaniste du devenir des produits phytosanitaires dans l'environnement souterrain : application à la protection des captages en aquifère

Vincent Guinot

► To cite this version:

Vincent Guinot. Modélisation mécaniste du devenir des produits phytosanitaires dans l'environnement souterrain : application à la protection des captages en aquifère. Ecologie, Environnement. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1995. Français. NNT: . tel-00785944

HAL Id: tel-00785944

<https://theses.hal.science/tel-00785944>

Submitted on 7 Feb 2013

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

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



THESE

Présentée par

Vincent GUINOT

Ingénieur ENSHMG

pour obtenir le titre de

DOCTEUR

de l'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER - GRENOBLE I

(Arrêtés ministériels du 5 juillet 1984 et du 30 mars 1992)

Spécialité : MECANIQUE

SUJET

**MODELISATION MECANISTE DU DEVENIR DES PRODUITS
PHYTOSANITAIRES DANS L'ENVIRONNEMENT SOUTERRAIN
APPLICATION A LA PROTECTION DES CAPTAGES
EN AQUIFERE**

Date de soutenance: 7 juillet 1995

Composition du jury :

M. L. CHARLET	Président
M. A. DELMAS	Rapporteurs
M. G. SCHMITZ	
M. M. ERLICH	Examineurs
Mme I. FEIX	
M. M. VAUCLIN	
M. N. FAUCHON	Invité

Univ. J. Fourier - O.S.U.G.
MAISON DES GEOSCIENCES
DOCUMENTATION
B.P. 53
F. 38041 GRENOBLE CEDEX
Tel. 04 76 63 54 27 - Fax 04 76 51 40 58
Mail : plalour@ujf-grenoble.fr

Thèse préparée au sein du Laboratoire d'Hydraulique de France en collaboration avec le
Laboratoire d'Etude des Transferts en Hydrologie et Environnement
(UJF, INPG, CNRS URA 1512)

SOMMAIRE

Univ. J. Fourier - O.S.U.G.
 MAISON DES GEOSCIENCES
 DOCUMENTATION
 B.P. 53
 F. 38041 GRENOBLE CEDEX
 Tél. 04 76 63 54 27 - Fax 04 76 51 40 58
 Mail : p.lour@ujf-grenoble.fr
 19 AOÛT 2003

INTRODUCTION.....	1
I - MODÉLISATION DU DEVENIR DES PRODUITS PHYTOSANITAIRES ET PROTECTION DE LA RESSOURCE EN EAU.....	5
I-1. Introduction.....	5
I-2. Les Processus hydrodynamiques en milieu souterrain et leur modélisation.....	7
I-2.1. Définitions.....	7
I-3. Les Processus influençant le devenir des produits phytosanitaires en milieu souterrain et leur modélisation.....	10
I-3.1. Equation du transport.....	10
I-3.2. Transport dans la phase liquide.....	10
I-3.2.1. Expression du flux convectif.....	10
I-3.2.2. Expression du flux diffusif.....	10
I-3.3. Le phénomène d'adsorption.....	10
I-3.3.1. Modèles de type L.E.A.....	12
I-3.3.2. Modèles de type cinétique chimique (NLEA).....	14
I-3.3.3. Ecriture simplifiée de l'équation du transport en présence d'adsorption.....	16
I-3.4. Répartition entre phases liquide et gazeuse.....	17
I-3.5. Termes sources/dégradation.....	18
I-3.6. Equation du transport utilisée dans le cadre de la thèse.....	19
I-4. Les outils de modélisation : état de l'art.....	19
I-4.1. Vocabulaire et notions liés à la modélisation.....	19
I-4.2. Critères de classification des outils de modélisation.....	22
I-4.3. Outils déterministes.....	24
I-4.3.1. Outils déterministes mécanistes.....	24
I-4.3.2. Outils déterministes fonctionnels.....	26
I-4.4. Outils stochastiques.....	27
I-4.4.1. Outils déterministes utilisés dans un contexte stochastique.....	27
I-4.4.2. Modèles statistiques mécanistes.....	27
I-5. Les incertitudes liées à la modélisation.....	28
I-5.1. Influence de la variabilité spatiale des caractéristiques du milieu sur les quantités infiltrées.....	28
I-5.2. Influence de la variabilité spatiale des caractéristiques du milieu sur les propriétés de transport.....	28
I-5.3. Modélisation et prévention de risque.....	30
I-6. Risque et vulnérabilité: revue bibliographique.....	30
I-6.1. Les notions de risque et de vulnérabilité.....	30
I-6.1.1. Risque.....	30
I-6.1.2. Vulnérabilité.....	32
I-6.2. Méthodes de caractérisation de la vulnérabilité.....	32
I-6.2.1. Potentiel de contamination.....	33
I-6.2.2. Vulnérabilité intrinsèque.....	34
I-6.2.3. Vulnérabilité spécifique.....	36
I-6.2.4. Récapitulatif.....	37
I-7. Conclusions.....	38

II - MODELISATION HYDROLOGIQUE DE BASSINS VERSANTS AVEC LE LOGICIEL MIKE SHE.....	39
II-1. Objectif de la modélisation - Présentation du site	39
II-1.1. Choix du site	39
II-1.2. Choix de l'outil de modélisation.....	40
II-2. Le système de modélisation MIKE SHE.....	41
II-2.1. Généralités sur MIKE SHE	41
II-2.2. Module de calcul de l'évapotranspiration	42
II-2.3. Module d'écoulements dans la zone non saturée.....	43
II-2.4. Module d'écoulements dans la zone saturée.....	44
II-2.5. Module d'écoulements de surface.....	45
II-2.6. Données nécessaires à la modélisation.....	46
II-3. Modélisation d'un bassin versant de grande taille, le bassin du Grand Morin	47
II-3.1. Description du site	47
II-3.1.1. Situation géographique	47
II-3.1.2. Pédologie, occupation des sols	48
II-3.1.3. Géologie du bassin.....	49
II-3.1.4. Pluviométrie.....	50
II-3.2. Données disponibles et choix de modélisation.....	51
II-3.2.1. Structure du modèle.....	51
II-3.2.2. Géométrie	52
II-3.2.3. Données pédologiques.....	52
II-3.2.4. Données agronomiques	52
II-3.2.5. Données hydrogéologiques.....	55
II-3.2.6. Données climatiques.....	55
II-3.2.7. Données hydrométriques.....	56
II-3.3. Réglage du modèle du bassin versant du Grand Morin.....	56
II-3.3.1. Méthodologie de réglage d'un modèle MIKE SHE	56
II-3.3.2. Réglage de la composante d'évapotranspiration : critère de bilan	57
II-3.3.3. Estimation de l'épaisseur de la nappe alluviale: critère de bilan.....	61
II-3.3.4. Estimation des conductivités à saturation des sols: critère dynamique	61
II-3.3.5. Estimation de la porosité de la nappe des calcaires de Champigny: critère dynamique	63
II-3.4. Critères pertinents pour le réglage du modèle MIKE SHE d'un bassin versant de taille moyenne	65
II-4. Modélisation du bassin versant du Vannetin.....	65
II-4.1. Description du site	65
II-4.2. Données disponibles et choix de modélisation.....	66
II-4.2.1. Structure du modèle.....	66
II-4.2.2. Méthodologie de modélisation.....	66
II-4.3. Réglage du modèle sur le bassin versant du Vannetin	67
II-4.3.1. Réglage de la conductivité hydraulique de la couche de marnes	67
II-4.3.2. Réglage des conductivités hydrauliques en aquifère: critères dynamiques.....	68
II-4.3.3. Réglage des conductivités hydrauliques en aquifère: critère de bilan	69
II-4.4. Critères pertinents pour le réglage du modèle MIKE SHE d'un bassin versant de petite taille.....	69
II-5. Eléments de validation, limitations de la modélisation et du logiciel.....	70
II-5.1. Rappels sur la notion de validation	70
II-5.2. Eléments de réglage et de validation.....	71
II-5.2.1. Choix du critère de réglage/validation.....	71
II-5.2.2. Résultats de réglage et de validation.....	71
II-5.2.3. Pertinence des critères de réglage et de validation.....	78
II-5.2.4. Limitations de la méthodologie de validation adoptée.....	82

II-5.3. Limitations de la modélisation entreprise.....	83
II-5.3.2. Limitations du modèle.....	87
II-6. Conclusions	89
III - DETERMINATION DE LA PRESSION DE POLLUTION ADMISSIBLE : METHODOLOGIE PROPOSEE	91
III-1. Rappels : objectifs.....	91
III-2. Pratiques actuelles de protection des captages.....	92
III-3. Méthodologie proposée.....	93
III-3.1. Hypothèses de base - principe général.....	93
III-3.2. Détermination de la concentration admissible dans l'aquifère.....	95
III-3.3. Détermination de la pression de pollution admissible dans le cas de transferts verticaux dans la zone non saturée	97
III-3.4. Détermination de la pression de pollution admissible dans le cas de parcelles drainées	98
III-4. Contexte de simplification des calculs dans la zone non saturée.....	100
III-4.1. Objectifs.....	100
III-4.2. Approche théorique.....	101
III-4.3. Domaine de validité des simplifications	103
III-4.3.1. Conditions requises pour une concentration résiduelle nulle: analyse harmonique	103
III-4.4. Influence de la conductivité hydraulique à saturation	109
III-4.5. Conclusions.....	110
III-5. Application à un site-test	112
III-5.1. Présentation du site.....	112
III-5.2. Détermination de la concentration admissible dans l'aquifère.....	113
III-5.3. Détermination de la pression de pollution admissible.....	116
III-6. Conclusions	119
IV - DETERMINATION DE LA PRESSION DE POLLUTION ADMISSIBLE: PRISE EN COMPTE DE LA VARIABILITE SPATIALE.....	121
IV-1. Objectifs et méthodes de prise en compte de l'incertitude	121
IV-1.1. Motivation de l'approche	121
IV-1.2. Retour sur la notion de risque de contamination	122
IV-1.3. Méthodes de prise en compte de la variabilité spatiale et de l'incertitude sur les caractéristiques de sol: revue bibliographique.....	123
IV-1.3.1. Principe et classification des méthodes.....	123
IV-1.3.2. Génération de champs aléatoires: revue bibliographique.....	125
IV-2. Méthodologie adoptée.....	126
IV-2.1. Paramètres pris en compte	126
IV-2.2. Génération de champs aléatoires par la méthode des bandes tournantes	127
IV-2.3. Influence de la structure spatiale des champs.....	129
IV-3. Données et résultats	131
IV-3.1. Données utilisées.....	131
IV-3.1.1. Propriétés de l'aquifère	131
IV-3.1.2. Propriétés de la zone non saturée.....	132
IV-3.2. Incertitudes sur la pression de pollution admissible.....	132
IV-3.2.1. Concentration admissible dans la zone saturée	132
IV-3.2.2. Pression de pollution admissible à la surface du sol.....	136

IV-3.3. Influence de la structure spatiale de l'aquifère.....	139
IV-4. Conclusions.....	144
V - CONCLUSION GENERALE.....	147
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....	151
ANNEXE I: MODES DE DICRETISATION AUX DIFFERENCES FINIES DES EQUATIONS DE L'ÉCOULEMENT EN MILIEU SOUTERRAIN.....	163
AI-1. Résolution unidirectionnelle verticale des équations de l'écoulement dans la zone non saturée.....	163
AI-1.1. Rappel sur la loi de Richards.....	163
AI-1.2. Résolution numérique.....	164
AI-1.2.1. Principe du schéma décalé à trois points.....	164
AI-1.2.2. Méthodes d'estimation de la conductivité hydraulique à l'interface.....	166
AI-2. Résolution des équations de l'écoulement dans la zone saturée.....	168
AI-2.1. L'équation de Boussinesq.....	169
AI-2.2. Evaluation des différentes méthodes de pondération de la transmissivité.....	169
AI-2.2.1. Nappe libre idéalisée en régime permanent.....	169
AI-2.3.1. Nappe captive barrée par une couche semi-perméable en régime permanent.....	172
AI-3. Conclusion générale.....	177
ANNEXE II: VALIDATION DU MODELE MIKE SHE DU BASSIN DU GRAND MORIN (REGION PARISIENNE).....	179
AII-1. Méthodes et critères d'évaluation.....	179
AII-1.1. Méthodes d'évaluation de la qualité d'un ajustement de paramètres.....	179
AII-1.1.1. Approche qualitative.....	179
AII-1.1.2. Approche statistique.....	180
AII-1.2. Résultats présentés.....	181
AII-2. EVALUATION DU REGLAGE.....	182
AII-2.1. Evaluation qualitative.....	182
AII-2.2. Evaluation statistique.....	182
AII-3. Evaluation de la validation.....	188
AII-3.1. Evaluation qualitative.....	188
AII-3.2. Evaluation statistique.....	189
ANNEXE III: PROBLEMES NUMERIQUES LIES AU CALCUL INVERSE DU TRANSPORT DE PRODUITS PHYTOSANITAIRES DANS LA ZONE SATUREE.....	207
AIII-1. Objet de l'annexe.....	207
AIII-2. Problèmes liés aux logiciels aux différences finies.....	208
AIII-2.1. Notions de base en analyse numérique.....	208
AIII-2.2. Relations de base.....	209
AIII-2.3. Instabilités générées lors de la résolution classique de l'équation inverse du transport.....	211
AIII-2.3.1. Etape de convection.....	211
AIII-2.3.2. Etape de dégradation inverse.....	213
AIII-2.3.3. Amplification sur un pas de temps.....	214
AIII-3. Calculs de transport par la méthode des caractéristiques: le logiciel ARGOS.....	215

AIII-3.1. Présentation du logiciel.....	215
AIII-3.2. Méthodologie d'utilisation.....	215
AIII-3.3. Problèmes généraux liés à l'utilisation de la méthode des caractéristiques.....	216

LISTE DES FIGURES

Figure I-1: cycle des produits phytosanitaires (d'après Vachaud and Vauclin, 1992)	6
Figure I-2: Variations de la porosité et Volume Elémentaire Représentatif (d'après Bear, 1972).....	8
Figure I-3: Allures des différents isothermes d'adsorption.....	14
Figure I-4: Evolution du facteur retard en fonction de la concentration en phase liquide pour différentes modélisations de l'adsorption instantanée.....	17
Figure I-5: les étapes de la modélisation mathématique	20
Figure II-1 : principaux compartiments naturels pris en compte dans la modélisation MIKE SHE.....	41
Figure II-2: Signification physique du coefficient d'emmagasinement.....	45
Figure II-3: Géographie du bassin du Grand Morin	47
Figure II-4: Profil en long schématique du Grand Morin.....	48
Figure II-5: Structure géologique schématique de la Brie au niveau du bassin du grand Morin	50
Figure II-6: Répartition en intensité et en fréquence des pluies mensuelles (d'après PIREN-SEINE, 1991).....	51
Figure II-7: Distribution spatiale des sols du modèle MIKE SHE	53
Figure II-8: Répartition spatiale des types de végétation du modèle MIKE SHE.....	54
Figure II-9: Carte piézométrique de l'aquifère de Champigny (d'après Mégny, 1979)	55
Figure II-10: Position des piézomètres dans l'aquifère de Champigny.....	64
Figure II-11: Piézométrie mesurée (d'après BRGM, 1994).....	64
Figure II-12: Différence entre les surfaces piézométriques calculées dans la nappe de Champigny pour des valeurs de la conductivités de la couche de marnes de 5.10^{-9} et 10^{-9} m.s^{-1}	68
Figure II-13.a: Débits observés et simulés à Pommeuse sur la période 1987-1988	72
Figure II-13.b: Débits observés et simulés à Pommeuse sur la période 1989-1990.....	73
Figure II-14: Débits observés et simulés à Pommeuse sur la période 1984-1986.....	76
Figure II-15: Points de sondage des charges calculées.....	79
Figure II-16: Comparaison des charges calculées dans l'aquifère pour différentes simulations	80
Figure II-17: Comparaison des débits calculés et observés à Pommeuse en 1986.....	81
Figure II-18: évolution des charges calculées au niveau des points de sondage	85
Figure II-19: comparaison des débits mesuré et simulé pour les simulations de référence et la reprise.....	86
figure III.1 : configuration typique de l'écoulement dans une parcelle drainée	95
Figure III.2 : cas des transferts verticaux dans la zone non saturée.....	97
Figure III.3 : cas des transferts dans les parcelles drainées.....	100
Figure III.4 : Échelles intégrales pour différentes valeurs de recharge pour l'harmonique annuelle	106
Figure III.5 : Échelles intégrales pour différentes harmoniques pour une recharge de 200 mm/an.....	107
Figure III.6 : Concentrations à différentes profondeurs pour deux valeurs différentes de la conductivité hydraulique à saturation, pour une recharge de 200 mm/an	108
Figure III.7: Coefficients de Fourier de la concentration dans l'aquifère en fonction du temps.....	109
Figure III.8: Valeurs du maximum de la concentration dans la nappe pour différentes valeurs de la distance surface- nappe et de la conductivité hydraulique à saturation du sol	111
Figure III-9 : site-test choisi pour l'application de la méthodologie.....	113
Figure III-10: Champ calculé des vitesses de Darcy dans l'aquifère de Champigny.....	114
Figure III-11 : concentration admissible dans l'aquifère.....	116
Figure III-12: distance surface du sol-nappe	118
Figure III-13 : pression de pollution admissible	118
Figure III-14 : Contamination de la zone d'influence du pompage à partir d'un point extérieur à l'enveloppe des trajectoires.....	119
Figure IV-1: Génération d'une variable sur un maillage bidimensionnel à partir d'une distribution aléatoire sur une ligne (d'après Mantoglou et Wilson, 1982).....	128
Figure IV-2.a: Champ bidimensionnel de conductivité hydraulique en aquifère (unité: 10^{-5} m.s^{-1}) généré par la méthode des bandes tournantes	130
Figure IV-2.b: Variogrammes théorique et expérimentaux obtenus par la méthode des bandes tournantes.....	130
Figure IV-3: premier décile de la concentration admissible dans l'aquifère	133
Figure IV-4: neuvième décile de la concentration admissible dans l'aquifère.....	134

Figure IV-5: valeur moyenne de la concentration admissible dans l'aquifère.....	134
Figure IV-6: écart-type de la concentration admissible dans l'aquifère	135
Figure IV-7: moment d'ordre 3 de la concentration admissible dans l'aquifère	135
Figure IV-8: moment d'ordre 4 de la concentration admissible dans l'aquifère	136
Figure IV-9: premier décile de la pression de pollution admissible	137
Figure IV-10: neuvième décile de la pression de pollution admissible	137
Figure IV-11: loi de distribution empirique de la concentration admissible en aquifère.....	138
Figure IV-12: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 7500 m; et une portée de la durée de vie de 7500 m	140
Figure IV-13: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 7500 m et une portée de la durée de vie de 3500 m	140
Figure IV-14: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 7500 m et une portée de la durée de vie de 200 m.....	141
Figure IV-15: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 3500 m et une portée de la durée de vie de 7500 m	141
Figure IV-16: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 3500 m et une portée de la durée de vie de 3500 m	142
Figure IV-17: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 3500 m et une portée de la durée de vie de 200 m.....	142
Figure IV-18: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 200 m et une portée de la durée de vie de 7500 m.....	143
Figure IV-19: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 200 m et une portée de la durée de vie de 3500 m.....	143
Figure IV-20: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 200 m et une portée de la durée de vie de 200 m.....	144
Figure AI-1: Schéma de discrétisation unidirectionnel à trois points de l'équation de Richards.....	165
Figure AI-2: configuration de calcul pour la nappe libre idéalisée.....	170
Figure AI-3: comparaison des effets des méthodes d'estimation pour une hauteur de suintement de 0,5 m.....	171
Figure AI-4: comparaison des effets des méthodes d'estimation pour une hauteur de suintement de 2 m	172
Figure AI-5: configuration de calcul pour la nappe captive barrée par une couche semi-perméable.....	173
Figure AI-6: comparaison des effets des méthodes d'estimation pour une largeur $l = 100$ m.....	176
Figure AI-7: comparaison des effets des méthodes d'estimation pour une largeur $l = 300$ m.....	176
figure AII.1.a: débits simulés et mesurés à Pommeuse en fonction du temps.....	183
figure AII.1.b: débits simulés et mesurés à Pommeuse en fonction du temps.....	184
figure AII.2: erreurs absolue et relative sur les débits calculés	185
figure AII.3: débits calculés et erreurs de simulation en fonction des débits mesurés.....	186
figure AII.4: fonction de distribution des débits mesuré et calculé à Pommeuse (période 1987-1990)	187
figure AII.5: débits calculé et mesuré à Pommeuse en fonction du temps (modèle de référence).....	190
figure AII.6: débits calculé et mesuré à Pommeuse en fonction du temps (modèle avec modification de la conductivité hydraulique de l'aquifère de Champigny).....	191
figure AII.7: débits calculé et mesuré à Pommeuse en fonction du temps (modèle avec modification de la porosité de l'aquifère de Champigny).....	192
figure AII.8: débits calculé et mesuré à Pommeuse en fonction du temps (simulation de reprise).....	193
figure AII.9: erreurs absolue et relative sur le débit calculé à Pommeuse (modèle de référence)	194
figure AII.10: erreurs absolue et relative sur le débit calculé à Pommeuse (modèle avec modification de la conductivité hydraulique de l'aquifère de Champigny).....	195
figure AII.11: erreurs absolue et relative sur le débit calculé à Pommeuse (modèle avec modification de la porosité de l'aquifère de Champigny)	196
figure AII.12: erreurs absolue et relative sur le débit calculé à Pommeuse (simulation de reprise).....	197
figure AII.13: débit calculé et erreurs en fonction du débit mesuré à Pommeuse (modèle de référence).....	198
figure AII.14: débit calculé et erreurs en fonction du débit mesuré à Pommeuse (modèle avec modification de la conductivité hydraulique de l'aquifère de Champigny).....	199
figure AII.15: débit calculé et erreurs en fonction du débit mesuré à Pommeuse (modèle avec modification de la porosité de l'aquifère de Champigny).....	200
figure AII.16: débit calculé et erreurs en fonction du débit mesuré à Pommeuse (simulation de reprise).....	201
figure AII.17: densité de probabilité des débits mesuré et simulé à Pommeuse (modèle de référence).....	202

figure AII.18: fonction de distribution des débits mesuré et simulé à Pommeuse (modèle avec modification de la conductivité hydraulique de l'aquifère de Champigny) - a: janvier-décembre; b: mois de janvier et février uniquement.....	203
figure AII.19: fonction de distribution des débits mesuré et simulé à Pommeuse (modèle avec modification de la porosité de l'aquifère de Champigny) - a: janvier-décembre; b: mois de janvier et février uniquement.....	204
figure AII.20: fonction de distribution des débits mesuré et simulé à Pommeuse (simulation de reprise).....	205

LISTE DES TABLEAUX

Tableau I-1 : principaux outils existants pour la modélisation du devenir des produits phytosanitaires	27
Tableau I-2 : synoptique des différentes méthodes d'évaluation de la vulnérabilité.....	37
Tableau II-1: granulométrie des trois principaux types de sols.....	49
Tableau II-2 : paramètres de référence de l'étude de sensibilité.....	58
Tableau II-3 : influence des paramètres de modélisation sur l'évapotranspiration calculée ET.....	59
Tableau II-4: évapotranspiration moyenne annuelle pour les différents types de zone non saturée avec les paramètres retenus	60
Tableau II-5 : caractéristiques hydrodynamiques des sols.....	60
Tableau II-6: Débit mesuré en rivière en fonction de l'épaisseur de la nappe.....	61
Tableau II-7: estimations de la conductivité hydraulique à saturation des sols obtenues par calage du ruissellement Hortonien.....	63
Tableau II-8: conductivités hydrauliques des aquifères de Brie et de Champigny(d'après Mégrien, 1979)	67
Tableau III-1 : paramètres retenus pour le modèle de transport dans l'aquifère	115
Tableau III-2: Paramètres des modèles LEACHP pour l'atrazine.....	117
Tableau III-3: Valeurs du maximum de la masse d'atrazine dans l'aquifère pour deux profondeurs de nappe.....	117
Tableau AII.1: Propriétés statistiques des débits mesurés et simulés à Pommeuse (période 1987-1990)	187
Tableau AII.2: Propriétés statistiques des débits mesurés et simulés à Pommeuse (modèle de référence)	202
Tableau AII.3: Propriétés statistiques des débits mesurés et simulés à Pommeuse (modèle avec modification de la conductivité hydraulique de l'aquifère de Champigny).....	203
Tableau AII.4: Propriétés statistiques des débits mesurés et simulés à Pommeuse (modèle avec modification de la porosité de l'aquifère de Champigny).....	204
Tableau AII.5: Propriétés statistiques des débits mesurés et simulés à Pommeuse(simulation de reprise).....	205

LISTE DES SYMBOLES

<i>Symbole</i>	<i>Signification</i>	<i>Dimension</i>
a	Portée du semi-variogramme	L
b	Exposant dans la formule d'Averjanov	adim.
C	Concentration en phase liquide	M.L ⁻³
\bar{C}	Concentration moyenne dans le temps en phase liquide	M.L ⁻³
C	Concentration résiduelle en phase liquide	M.L ⁻³
C1, C2	Paramètres du modèle d'évapotranspiration de Kristensen et Jensen	adim.
C3	Paramètre du modèle d'évapotranspiration de Kristensen et Jensen	L.T ⁻¹
C _a	Concentration admissible en aquifère	M.L ⁻³
C _{air}	Concentration en phase gazeuse	M.L ⁻³
C _c	Capacité capillaire	L ⁻¹
C _{int}	Capacité d'interception du feuillage	L
C _p	Concentration admissible de recharge de l'aquifère en produit phytosanitaire	M.L ⁻³
CR	Capacité de renouvellement de l'aquifère	T ⁻¹
C _o	Concentration en produit phytosanitaire tolérée au niveau du captage	M.L ⁻³
C _r	Coût induit par l'apparition d'un événement (analyse de risque)	selon nature de C _r
C _s	Concentration de solubilité du produit phytosanitaire considéré	M.L ⁻³
D	Diffusivité	L ² .T ⁻¹
D _{cin}	Diffusivité associée à la dispersion cinématique	L ² .T ⁻¹
d _{dr}	Distance horizontale entre drains	L
D _g	Diffusivité du produit phytosanitaire en phase gazeuse	L ² .T ⁻¹
D _{mol}	Diffusivité moléculaire	L ² .T ⁻¹
E _p	Evapotranspiration potentielle	L.T ⁻¹
E _{at}	Evapotranspiration réelle	L.T ⁻¹
ET	Evapotranspiration réelle moyenne	L.T ⁻¹
ET _{cum}	Evapotranspiration réelle cumulée	L
F	Fraction de sites d'adsorption de type 1 dans les modélisations d'adsorption à deux types de site	adim.
F _r	Fonction de distribution (probabilité de dépassement) de la concentration au niveau du captage	adim.
F _x , F _y	Pentes de la ligne d'énergie	adim.
f _T	Fonction de transfert caractérisant la variable X _r	dépendante de X _r

f_{oc}	Fraction de carbone organique du sol	adim.
g	Accélération de la pesanteur	$L.T^{-2}$
H	Charge hydraulique	L
h_c	Epaisseur de l'aquifère	L
h_r	Epaisseur de la lame d'eau ruisselée	L
I_x, I_y	Pentes du substratum	adim.
K	Conductivité hydraulique	$L.T^{-1}$
\bar{K}	Conductivité hydraulique moyenne	$L.T^{-1}$
k_1, k_2, k_3	Constantes d'adsorption utilisées dans les modélisations à plusieurs types de site	Fonction de la loi considérée
K_d	Constante d'adsorption linéaire du produit en solution	$L^3.M^{-1}$
K_F	Constante d'adsorption de FREUNDLICH du produit en solution	Fonction de N
K_H	Constante de HENRY du produit en solution	adim.
K_L	Constante d'adsorption de LANGMUIR du produit en solution	$L^3.M^{-1}$
K_{oc}	Constante de partition du produit phytosanitaire sur le carbone organique	$L^3.M^{-1}$
K_s	Conductivité hydraulique à saturation	$L.T^{-1}$
l_h	Distance de transfert en aquifère	L
l_v	Dimension verticale de nuage de soluté	L
L	Distance surface du sol-nappe	L
L_k^I	Echelle intégrale associée à l'harmonique k sur la période T	L
LAI	Indice de couverture végétale dans le modèle de Kristenen et Jensen	adim.
M_{sat}	Masse de produit phytosanitaire contenue dans la zone saturée par unité de surface	$M.L^{-2}$
N	Exposant de Freundlich	adim.
P	Intensité de pluie	$L.T^{-1}$
\mathcal{P}	Propriété physique quelconque du milieu naturel	variable selon \mathcal{P}
P_{atm}	Pression atmosphérique	$M.L^{-1}.T^{-2}$
P_c	Pression capillaire	$M.L^{-1}.T^{-2}$
P_{cum}	Pluie cumulée	L
P_{eau}	Pression dans l'eau	$M.L^{-1}.T^{-2}$
PP	Pression de pollution (taux d'épandage) en produit phytosanitaire	$M.L^{-2}$
P_r	Probabilité d'apparition d'un événement (analyse de risque)	adim.
P_v	Pression de vapeur saturante du produit phytosanitaire	$M.L^{-1}.T^{-2}$
Q	Recharge hydraulique de l'aquifère	$L.T^{-1}$
\bar{Q}	Recharge hydraulique moyenne dans le temps de l'aquifère	$L.T^{-1}$
q	Recharge hydraulique résiduelle de l'aquifère	$L.T^{-1}$
Q_{apport}	Terme d'apport en produit phytosanitaire	$M.L^{-3}.T^{-1}$

Q_{ex}	Débit hydraulique instantané à l'exutoire	$L^3.T^{-1}$
Q_{lim}	Débit hydraulique spécifique cumulé sortant par les limites du bassin	L
Q_p	Pression de pollution admissible en produit phytosanitaire	$M.L^{-2}$
Q_h	Terme source/puits hydrique dans les zones saturée et non saturée	T^{-1}
QR	Débit de recharge	$L^3.T^{-1}$
Q_s	Terme source/puits en soluté dans les zones saturée et non saturée	$M.L^{-3}.T^{-1}$
R	Facteur retard	adim.
\mathcal{R}	Risque	selon nature de \mathcal{R}
RDF	Densité racinaire	adim.
S	Concentration en phase solide	$M.L^{-3}$
S_b	Superficie du bassin	L^2
S_f	Terme de frottement (équation de l'onde diffusive)	$L.T^{-1}$
S_y	Coefficient d'emmagasinement	adim.
t	Coordonnée temporelle	T
T	durée	T
t_c	Durée de transfert convectif	T
T_D	Durée de transfert par diffusion dans la phase gazeuse	T
TR	Durée de renouvellement de l'eau dans l'aquifère	T
V	Indice de vulnérabilité	selon nature de V
V_A	Volume de l'aquifère	L^3
V_d	Vitesse de Darcy	$L.T^{-1}$
V_i	Vitesse intersticielle	$L.T^{-1}$
x	Coordonnée horizontale d'espace	L
X_o	Variable représentant l'objectif (analyse de risque)	dépendante de X_o
X_r	Variable représentant l'état de réalité (analyse de risque)	dépendante de X_r
y	Coordonnée horizontale d'espace	L
z	Coordonnée verticale d'espace (cote)	L
α_L	Dispersivité longitudinale	L
α_T	Dispersivité transversale	L
ΔSt	Variation de stock hydrique du bassin	L
Φ_D	Flux diffusif	$M.L^{-1}.T^{-1}$
η	Porosité	adim.
λ	Coefficient de dégradation d'un produit donné	T^{-1}
Λ_m	Coefficient de dégradation du m-ième produit mère	T^{-1}
θ	Teneur en eau volumique	adim.
$\bar{\theta}$	Teneur en eau volumique moyenne dans la zone non saturée	adim.
θ_{fc}	Teneur en eau volumique à la capacité au champ	adim.

θ_r	Teneur en eau volumique résiduelle	adim.
θ_w	Teneur en eau volumique au point de flétrissement	adim.
σ_k	phase associée à l'harmonique k sur la période T	L^{-1}
ω_k	Pulsation associée à l'harmonique k sur la période T	T^{-1}
ρ_d	Masse volumique du sol sec	$M.L^{-3}$
ρ_{eau}	Masse volumique de l'eau	$M.L^{-3}$
τ	Demi-vie du produit phytosanitaire	T
τ_r	Durée de relaxation	T
ψ	Pression capillaire dans la zone non saturée	L
ψ_{fc}	Pression capillaire au champ	L
ψ_w	Pression capillaire au point de flétrissement	L

INTRODUCTION

Résumé

L'utilisation par les agriculteurs de fertilisants et de produits phytosanitaires entraîne un risque de contamination de la ressource en eau. Ce risque, joint aux exigences de qualité de cette dernière, a pour effet un accroissement de son coût et sa fragilisation.

Le souci de concilier l'emploi des produits de protection des cultures et la qualité de la ressource en eau a conduit en particulier à l'élaboration du projet EUREKA ISMAP, dont l'objectif est la réalisation d'un système d'information et d'aide à la décision pour la gestion des pollutions diffuses d'origine agricole. Dans ce système, la composante "modélisation" est appelée à jouer un rôle important.

Les travaux présentés dans ce mémoire entrent dans le cadre de cette composante: le but de cette thèse est la conception et l'application à un site-test d'une méthodologie d'utilisation des outils de simulation des transferts en milieu souterrain de l'eau et des contaminants, afin de déterminer les quantités maximales de produits phytosanitaires pouvant être épandues à la surface du sol, sans pour autant risquer de contaminer les captages en aquifère.

Le développement des techniques de production agricole a été marqué, depuis la seconde guerre mondiale, par le développement des techniques de fertilisation et de protection des cultures; les produits phytosanitaires, en éliminant une partie des agressions biologiques dont les cultures sont victimes, permettent une amélioration sensible de la productivité des exploitations. Néanmoins, l'utilisation répétée de ces produits peut entraîner la contamination chronique de la ressource en eau, la rendant inutilisable, ou grevant son coût de production, du fait de la nécessité d'implanter des installations de traitement.

Dans les pays développés, la qualité de la ressource en eau est sujette à une réglementation stricte. Ainsi, les normes européennes tolèrent une concentration en produits phytosanitaires dans les eaux de captage, limitée à $0,1 \mu\text{g.l}^{-1}$ par substance individuelle, et à $0,5 \mu\text{g.l}^{-1}$ pour le total des produits. Le dépassement de ces valeurs-guides dans les eaux de pompage entraîne un traitement de l'eau captée, ce qui se traduit par un surcoût de la ressource. En France, dans le cas où les concentrations en produits phytosanitaires sont supérieures à $5 \mu\text{g.l}^{-1}$, la distribution de l'eau captée est interdite, quand bien même il serait techniquement possible de la traiter.

Concilier la protection des cultures et la qualité de la ressource en eau passe par une meilleure gestion des apports futurs en produits phytosanitaires et par un suivi du devenir des apports passés dans les zones à risque. Toutefois, les facteurs influant sur le devenir des

produits phytosanitaires sont si nombreux (conditions climatiques, pratiques culturales, facteurs agronomiques, pédologie, géologie,...) que l'on n'envisage plus, à l'heure actuelle, de gérer les pratiques et les pollutions agricoles à l'échelle de grands bassins versants, sans avoir recours à des outils d'aide à la décision. C'est pourquoi, en 1990, a été lancé le projet EUREKA ISMAP (acronyme de Integrated System for the Management of Agricultural Pollutions), dont le but est la réalisation d'un système d'information et d'aide à la décision pour le suivi des pollutions d'origine agricole. La composante d'aide à la décision, notamment, s'appuie largement sur les outils de modélisation. Elle permettra entre autres de définir des périmètres de protection des captages, des valeurs-guides pour l'emploi des produits phytosanitaires, etc. (ISMAP, 1993.a; Usseglio-Polatera and Gatti, 1993).

La problématique de l'emploi des outils de modélisation se heurte à deux questions: le choix des outils d'une part - quelles sont les hypothèses sur les phénomènes physiques, les choix de modélisation - et la méthodologie d'utilisation de ces outils d'autre part. Outils et méthodologies dépendent bien sûr du type de problème à résoudre et du souci de raffinement que l'on apporte à son traitement. Les travaux présentés dans ce mémoire ont pour objet de définir et d'appliquer à un site-test une méthodologie d'utilisation d'outils de modélisation, en vue de déterminer les quantités maximales de produits phytosanitaires (désignées dans la suite de ce mémoire par "valeurs admissibles") que l'on peut tolérer à l'épandage, sans risquer d'entraîner, au niveau des captages en aquifère, un dépassement des normes de potabilité.

Des méthodologies existantes permettent d'estimer la vulnérabilité de la ressource en eau par rapport à la contamination par les produits phytosanitaires. Ces méthodes ne permettent cependant que d'établir une classification *relative*, entre zones plus ou moins sensibles. Elles ne donnent pas d'indications concrètes sur les taux admissibles d'épandage en produits phytosanitaires à la surface du sol. De plus, ces méthodes font souvent appel à des hypothèses simplificatrices, voire trop schématiques, qui ne sont pas forcément justifiées dans tous les cas.

La méthodologie proposée dans le cadre de cette thèse résout dans une large mesure ces problèmes, en fournissant des indications concrètes sur les taux admissibles d'épandage à la surface du sol. Elle s'appuie sur la modélisation mécaniste déterministe de l'hydrologie et du transfert des produits phytosanitaires en milieu souterrain. Un volet de cette méthodologie concerne la prise en compte des incertitudes et de la variabilité spatiale des caractéristiques du sol, qui jouent un rôle non négligeable vis-à-vis du devenir des produits phytosanitaires. La procédure mise au point et les résultats obtenus seront intégrés dans le système d'aide à la décision ISMAP.

Ce mémoire est articulé comme suit:

- dans le premier chapitre, nous présentons les divers phénomènes physiques et physico-chimiques qui régissent le devenir des produits phytosanitaires en milieu souterrain, ainsi que les grands principes de modélisation généralement adoptés; le problème de la prévention de la contamination des captages en aquifère est abordé par le biais des notions de risque et de vulnérabilité. Nous établissons un état de l'art sur les méthodologies existantes de l'estimation de la vulnérabilité de la ressource en eau;
- Le second chapitre traite de la modélisation hydrologique d'un site-test du projet ISMAP (ISMAP, 1987.b), le bassin du Grand Morin, qui contribue à l'alimentation en eau potable de la Région Parisienne. Cette étape nécessaire de nos travaux a permis de mener une réflexion sur la capacité de l'outil numérique à modéliser les processus s'y produisant.
- le troisième chapitre présente la méthodologie conçue dans le cadre de cette thèse, ainsi que les outils de modélisation retenus. On présentera également les résultats d'application de cette méthodologie au site-test du Grand Morin pour un produit phytosanitaire particulier, l'atrazine.
- Le quatrième chapitre aborde le problème de la variabilité spatiale des caractéristiques du sol et du sous-sol. En effet, la modélisation développée nécessite la connaissance de nombreux paramètres dont on sait que leur détermination est très incertaine et qu'ils présentent de grandes variations spatiales. Il est donc irréaliste - et dangereux - de prétendre dresser des cartes de quantités d'épandage admissibles à la surface du sol sans intégrer ces incertitudes sur les paramètres mis en jeu. La notion de pression de pollution admissible à la surface du sol, intégrant la notion de risque, doit être associée avec celle de *degré de confiance* dans la protection du captage. Dans ce chapitre, nous exposons comment, sur la base de simulations type Monte Carlo, nous avons mis en évidence l'influence de la variabilité spatiale des caractéristiques du sous-sol sur les quantités calculées.

I - MODÉLISATION DU DEVENIR DES PRODUITS PHYTOSANITAIRES ET PROTECTION DE LA RESSOURCE EN EAU

Résumé

Les outils de modélisation peuvent être d'un grand secours dans le domaine de la prise de décision liée aux pollutions par les produits phytosanitaires. La modélisation du devenir des produits phytosanitaires en milieu souterrain implique des simplifications et des choix dans la description des phénomènes en jeu; les principaux choix sont présentés ici, ainsi que divers outils de modélisation existants. Le problème de l'incertitude sur les paramètres de modélisation conduit à mettre en question la validité de la modélisation en tant qu'outil de prévision, d'où l'intérêt actuel pour les concepts de risque de contamination et de vulnérabilité de la ressource en eau, utiles du point de vue *préventif*. Le manque d'intérêt pratique du concept de vulnérabilité conduit cependant à envisager une approche alternative, abordée dans le chapitre III.

I-1. INTRODUCTION

La contamination des ressources en eau par les produits phytosanitaires n'est pas un phénomène nouveau; cependant, elle a acquis dans les dernières années une importance bien plus grande que par le passé (Ramade, 1992). Il devient donc nécessaire, lorsque l'on envisage d'utiliser un produit phytosanitaire sur un site agricole donné, d'estimer l'impact de cette utilisation sur la ressource en eau au niveau de ce site. Les outils de modélisation peuvent jouer un rôle important dans cette estimation, qu'ils soient utilisés en vue de la prédiction du devenir des contaminants ou pour la prévention de la pollution de la ressource (par exemple pour la définition de périmètres de protection des captages).

Le but des travaux présentés ici est de définir et d'appliquer une méthodologie d'utilisation d'outils de modélisation du devenir des produits phytosanitaires en milieu souterrain, dans le but d'aider à définir des modalités pratiques d'utilisation des produits phytosanitaires, tout en respectant des objectifs de qualité de la ressource en eau.

La section 2 décrit les processus hydrodynamiques qui jouent un rôle déterminant vis-à-vis du devenir des produits phytosanitaires, ainsi que leur modélisation dans un contexte mécaniste. La section 3 passe en revue les différents mécanismes agissant sur les produits phytosanitaires sous la surface du sol, ainsi que les différentes manières dont ils sont modélisés en règle générale. La section 4 recense les systèmes de modélisation du devenir des produits phytosanitaires en milieu souterrain les plus couramment mentionnés dans la

littérature ; la section 5 introduit le problème de la variabilité spatiale des caractéristiques des sols et les difficultés que pose sa représentation en termes de modélisation.

Le sixième paragraphe présente le concept de vulnérabilité, issu des problèmes posés par l'emploi de la modélisation en tant qu'outil de prédiction. Le paragraphe 7 présente enfin la nécessité d'une approche alternative, qui sera détaillée dans le second chapitre.

Après application sur les cultures, les produits phytosanitaires sont soumis à une série de processus susceptibles de provoquer la contamination des aquifères (Boesten, 1987). Leur devenir est lié à l'existence de plusieurs processus, biologiques et physico-chimiques, parmi lesquels on retiendra les suivants (Cf. figure I-1):

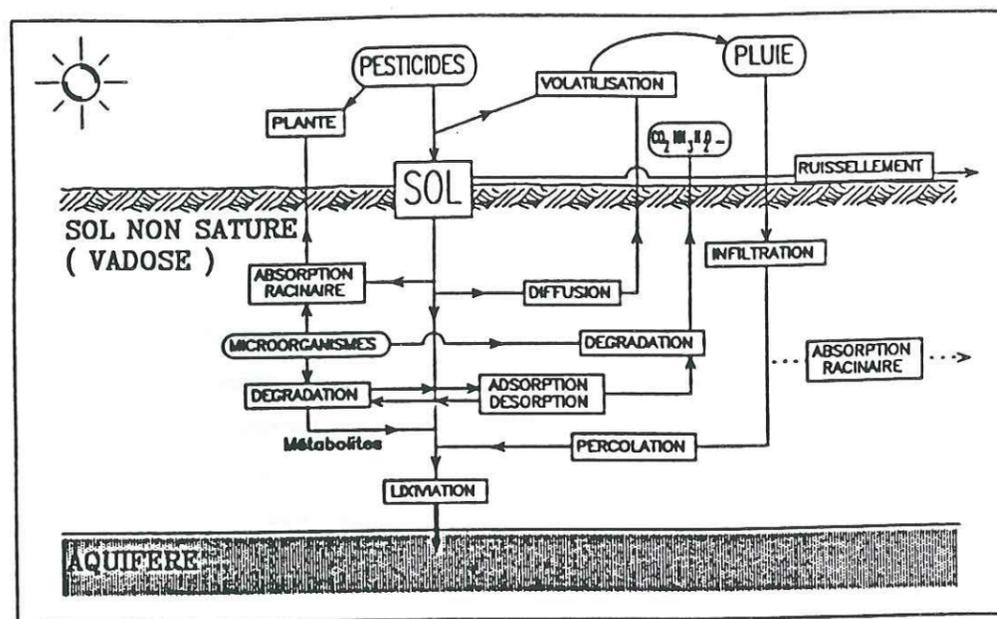


Figure I-1: cycle des produits phytosanitaires (d'après Vachaud and Vauclin, 1992)

Une fraction des produits épanchés est assimilée par les cultures elles-mêmes. La fraction restante, volatilisée à la surface du sol et du feuillage des plantes, retourne à l'atmosphère. Une partie de ces produits sous forme de vapeur est susceptible de se dissoudre dans l'eau de pluie est d'être ainsi réinfiltrée dans le sol.

Lorsque la pluie est trop intense pour être entièrement infiltrée dans le sol ou que la zone non saturée du sol disparaît par suite de la remontée de l'horizon saturé, le ruissellement apparaît. Les produits phytosanitaires contenus dans les couches supérieures du sol peuvent être alors emportés par les eaux de ruissellement, soit sous forme dissoute, soit sous forme adsorbée quand l'eau de ruissellement transporte des particules fines sur lesquelles ces produits se sont fixés.

La partie de produits phytosanitaires qui parvient à s'infiltrer est soumise à de nombreux phénomènes physiques, biologiques et physico-chimiques.

Dans la zone non saturée, une partie des produits en solution se volatilise et rejoint la phase gazeuse (ou aérée) du sol. Cette fraction volatilisée est susceptible à son tour, par diffusion gazeuse à travers les pores connectés à la surface du sol, de rejoindre l'atmosphère.

Une certaine quantité des produits restant en solution est prélevée par les racines des plantes en même temps que l'eau de la zone non saturée, une autre partie se fixe, par adsorption, sur la matrice poreuse du sol.

Le reste est soumis à de nombreux processus de dégradation, principalement en phase liquide: biodégradation par les micro-organismes (en majorité des bactéries aérobies), dégradation par hydrolyse ou par oxydo-réduction et photolyse (action du rayonnement solaire, limitée aux premiers centimètres du sol). Les produits de cette dégradation peuvent être également actifs chimiquement (on parle dans ce cas de métabolites) ou bien inertes (on emploie alors le terme de résidus).

Les produits phytosanitaires qui parviennent à la zone saturée du sol subissent également les phénomènes d'adsorption et de dégradation. Cependant, en raison de la plus faible teneur de la zone saturée en matières organiques, la dégradation et l'adsorption dans la zone saturée sont beaucoup moins importantes que dans la zone non saturée.

Le devenir des produits phytosanitaires dans le milieu souterrain est fortement conditionné par l'hydrodynamique, qui détermine la durée pendant laquelle ils seront soumis aux processus décrits ci-dessus.

On s'intéressera par la suite aux mécanismes se produisant sous la surface du sol.

I-2. LES PROCESSUS HYDRODYNAMIQUES EN MILIEU SOUTERRAIN ET LEUR MODELISATION

I-2.1. Définitions

Porosité

La porosité volumique d'un sol est définie comme le rapport du volume des vides au volume de ce sol. Elle peut être déterminée par exemple en prélevant un échantillon de sol saturé et en mesurant sa masse avant et après séchage. En règle générale, la valeur de la porosité dépend de la taille de l'échantillon considéré (Cf. figure I-2). Pour des volumes faibles, le nombre de pores contenu dans l'échantillon est trop petit pour permettre une prise de moyenne statistique: la porosité va subir des variations importantes en fonction de ce même volume

(région "microscopique" de la figure I-2). Lorsque le volume augmente, le nombre de pores devient suffisant pour définir une porosité constante: on parle alors de porosité "macroscopique". Le volume de sol qui délimite la frontière entre domaines microscopique et macroscopique est désigné sous le nom de Volume Élémentaire Représentatif (Bear, 1972). Enfin, suivant la nature du sol considéré, il peut exister une troisième région, dans laquelle la porosité va augmenter, en raison de la présence d'hétérogénéités à grande échelle. Dans la suite de ce mémoire, nous considérerons des grandeurs et des lois physiques définies à l'échelle du Volume Élémentaire Représentatif (VER).

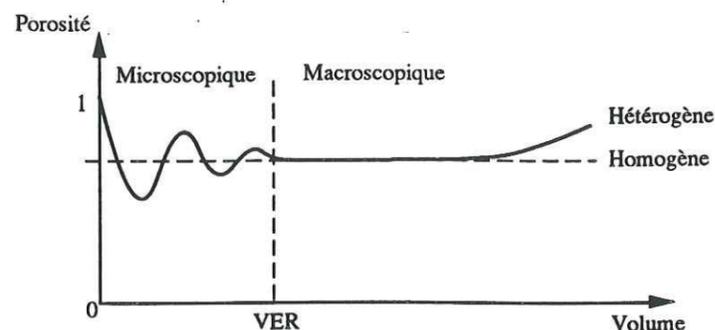


Figure I-2: Variations de la porosité et Volume Élémentaire Représentatif (d'après Bear, 1972)

Teneur volumique en eau

La teneur volumique en eau θ est définie comme le rapport entre le volume d'eau contenu dans un VER de sol et le volume de ce VER. Cette grandeur est adimensionnelle.

Pression capillaire

Lorsque le sol n'est pas totalement saturé, les phénomènes de tension superficielle à l'interface liquide-gaz provoquent une différence de pression entre les phases liquide et gazeuse. On suppose en général que la phase gazeuse est à la pression atmosphérique. La pression capillaire P_c (Pa) est définie comme:

$$P_c = P_{atm} - P_{eau} \quad (I.1)$$

avec P_{atm} pression atmosphérique (Pa) et P_{eau} la pression dans l'eau (Pa).

Cette pression capillaire est en général exprimée en terme d'une hauteur d'eau ψ (m), par la relation:

$$\psi = - \frac{P_c}{\rho_{eau} g} \quad (I.2)$$

où ρ_{eau} (kg.m^{-3}) est la masse volumique de l'eau et g (m.s^{-2}) l'accélération de la pesanteur.

ψ a une valeur négative dans le cas où le sol est non saturé. Sa valeur dépend des effets capillaires, elle est donc liée à la teneur en eau du sol. La relation $\psi(\theta)$, qui porte le nom de "courbe de succion", est une caractéristique du milieu poreux que l'on considère. Elle présente un caractère hystérétique (Thony, 1970) et est influencée par les effets dynamiques (Vauclin, 1971). Cependant, la plupart des modélisations négligent ces deux effets, ce qui conduit à des relations univoques entre pression capillaire et teneur en eau.

Loi de Darcy

Darcy (1856), pour un écoulement unidirectionnel dans un sol, a mis en évidence une dépendance linéaire entre le débit par unité de surface (encore appelé "vitesse de Darcy") et le gradient de la charge hydraulique. La généralisation de cette loi au cas tridimensionnel s'exprime:

$$V_d = - K \text{ Grad } H \quad (I.3)$$

où V_d (m.s^{-1}) est la vitesse de Darcy (vecteur), K (m.s^{-1}) la conductivité hydraulique (tenseur), H (m) la charge hydraulique et Grad l'opérateur vectoriel gradient.

La charge, qui représente une énergie par unité de poids, est en général définie par:

$$H = \psi + z \quad (I.4)$$

z (m) étant la cote (positive vers le haut) du point considéré.

Dans le cas d'un milieu isotrope, le tenseur K est diagonal sphérique, il se réduit donc à un scalaire. La valeur de K dépend des propriétés de la matrice poreuse et de l'eau (viscosité, masse volumique). Dans un milieu non saturé, cette conductivité dépend de la teneur en eau. On définit la vitesse interstitielle - ou "de pore" - V_i (m.s^{-1}) par:

$$V_i = \frac{V_d}{\theta} \quad (I.5)$$

Cette vitesse est celle à laquelle les particules fluides se déplacent réellement dans le sol.

Equation de Richards

Le principe de continuité s'écrit, en supposant le sol indéformable et l'eau incompressible:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \text{Div } V_d = Q_h \quad (I.6)$$

où Q_h (s^{-1}) représente le terme source/puits hydrique (exemple: prélèvement racinaire) et Div l'opérateur scalaire divergence. En introduisant l'expression de la vitesse de Darcy donnée dans (I.1), on obtient:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \text{Div}(-K \text{ Grad } H) = Q_h \quad (I.7)$$

En introduisant la capacité capillaire C_c (m^{-1}):

$$C_c = \frac{d\theta}{d\psi} \quad (I.8)$$

on obtient la formulation de Richards (1931):

$$C_c \frac{\partial \psi}{\partial t} = \text{Div} (K \text{ Grad} (\psi + z)) + Q_h \quad (1.9)$$

I-3. LES PROCESSUS INFLUENÇANT LE DEVENIR DES PRODUITS PHYTOSANITAIRES EN MILIEU SOUTERRAIN ET LEUR MODELISATION

I-3.1. Equation du transport

Le transport d'un produit phytosanitaire en solution dans l'eau du sol est décrit par l'équation suivante:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\underbrace{\rho_d S}_{(a)} + \underbrace{\theta C}_{(b)} + \underbrace{(\eta - \theta) G}_{(c)}) = - \text{Div} (\Phi_C + \Phi_D) + Q_s \quad (1.10)$$

où ρ_d est la masse volumique du sol sec (kg.m^{-3}), S la concentration du produit en phase solide (kg.kg^{-1} sol sec), C sa concentration en phase liquide (kg.m^{-3}), η la porosité du sol, G la concentration en phase gazeuse (kg.m^{-3}), Φ_C le flux convectif (grandeur vectorielle) en phase liquide ($\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$), Φ_D le flux diffusif (vecteur) en phase liquide ($\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$) et Q_s le terme source/puits ($\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$).

Le terme (a) représente l'accroissement au cours du temps de la quantité de produit en un point donné du sol; le terme (b) représente les apports en produit, par convection et diffusion, dans la phase liquide; le terme (c) renferme les termes sources ou puits divers, en particulier la dégradation des produits.

I-3.2. Transport dans la phase liquide

I-3.2.1. Expression du flux convectif

Le flux convectif Φ_C est donné par:

$$\Phi_C = V_d C \quad (1.11)$$

Cette formule exprime le fait que le produit est transporté dans la phase liquide uniquement.

I-3.2.2. Expression du flux diffusif

La diffusion est décomposée en deux termes, la diffusion moléculaire d'une part et la dispersion cinématique d'autre part. Si la première est liée aux caractéristiques du produit en solution, la seconde dépend de celles de l'écoulement. Le phénomène de dispersion est modélisé par une loi de Fick, qui considère que le flux diffusif Φ_D d'un produit est proportionnel au gradient de concentration de produit:

$$\Phi_D = - \theta D \text{ Grad} C \quad (1.12)$$

D étant la diffusivité ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$), égale à la somme de la diffusivité moléculaire D_{Mol} ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$) et de la diffusivité associée à la dispersion cinématique D_{Cin} ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$).

$$D = D_{\text{Mol}} + D_{\text{Cin}} \quad (1.13)$$

On adopte en général l'hypothèse que D_{Cin} est proportionnelle à la vitesse interstitielle de l'eau.

$$D_{\text{Cin}} = \alpha V_i \quad (\text{Bear et Verruijt, 1987}) \quad (1.14)$$

où α est la dispersivité (m). Dans un écoulement bi- ou tridirectionnel, on fait la distinction entre la dispersion se produisant dans la direction de l'écoulement (dispersion longitudinale) et la dispersion se produisant dans un plan orthogonal (dispersion transversale). On introduit alors deux coefficients, la dispersivité longitudinale α_L et la dispersivité transversale α_T .

On ajoutera que certaines modélisations (Van Genuchten et Wierenga, 1976 ; Brusseau, 1991 ; Brusseau et al., 1992) décrivent l'eau contenue dans le sol en termes de fraction mobile et immobile et en introduisant un coefficient d'échange cinétique entre ces deux fractions.

I-3.3. Le phénomène d'adsorption

Un produit phytosanitaire en solution dans l'eau d'un sol se répartit entre les trois phases présentes dans la zone non saturée: air, eau et matrice solide. Le processus de répartition entre l'eau et la matrice solide porte le nom d'adsorption. Il détermine pour une grande part la mobilité des produits dans les sols.

L'adsorption est due à la fixation, sur la matrice solide, d'une partie des molécules de produit phytosanitaire en solution dans l'eau souterraine. Cette fixation est assurée par des mécanismes physiques (forces de Van der Waals, pont hydrogène) ou chimiques (liaisons ioniques). On sépare habituellement les composants du sol en deux fractions distinctes, la fraction minérale et la fraction organique. L'adsorption des produits phytosanitaires se produit principalement sur les matériaux organiques (Calderbank, 1989), la fraction minérale, bien que possédant une grande surface spécifique, jouant un rôle peu actif dans ce processus. En particulier, si la teneur du sol en matières organiques dépasse un certain seuil (généralement quelques %), les sites d'adsorption de la fraction minérale se trouvent recouverts en quasi-totalité par les matières organiques qui les entourent (Khan, 1980), si bien que le rôle de la fraction minérale dans l'adsorption devient en pratique négligeable (Menzer et Nelson, 1986 ; cités par Calderbank, 1989 ; Calvet et al., 1980).

Les matériaux de nature organique étant relativement abondants dans les couches superficielles du sol, les produits phytosanitaires subissent une fixation par adsorption plus importante dans ces couches superficielles que dans les couches profondes.

dans le sol

pour un puits

La physico-chimie de l'adsorption dépend beaucoup de l'état hydrique du sol : sur un sol initialement sec, les molécules d'eau, qui possèdent une forte polarité, seront plus facilement adsorbées sur les sites hydrophiles que les produits phytosanitaires : ceux-ci se fixeront donc sur les sites hydrophobes. Les molécules de produit phytosanitaire sont alors orientées de telle façon que leur partie hydrophobe est éloignée de la surface de la matrice solide : elle bloque alors l'accès des autres sites d'adsorption aux molécules d'eau qui pourraient entrer dans les pores à la suite d'une éventuelle ré-humidification du sol. Ceci se traduit par un ralentissement de la désorption du produit.

Dans les sols riches en matières organiques notamment, les sites d'adsorption hydrophiles et hydrophobes se trouvent à proximité les uns des autres. Lorsque le sol est humide, les molécules de produits phytosanitaire peuvent migrer facilement de l'un à l'autre type de site, plus particulièrement vers les sites les moins accessibles de la matrice solide : cette migration vers des sites peu accessibles a également pour effet de ralentir la désorption du produit (Mingelgrin et al., 1993).

La modélisation de l'adsorption/désorption fait appel à deux grandes classes de modèles :

- Modèles faisant appel à une hypothèse d'équilibre local entre la phase dissoute et la phase adsorbée (hypothèse LEA - "Local Equilibrium Assumption") ;
- Modèles utilisant une formulation cinétique (hypothèse NLEA - "Non Local Equilibrium Assumption");

I-3.3.1. Modèles de type L.E.A.

Ces modèles font l'hypothèse que le temps caractéristique du phénomène d'adsorption/désorption est très petit, l'équilibre entre le traceur dans les phases liquide et solide étant atteint de manière quasi instantanée. Cette hypothèse est connue sous le nom d'hypothèse L.E.A. ("Local Equilibrium Assumption"- "Hypothèse de l'équilibre local"). La relation entre la concentration C du produit dans la phase liquide et sa concentration massique S (kg.kg^{-1} sol sec) dans la phase solide est donnée par une relation du type:

$$S = S(C) \quad (I.15)$$

Suivant les hypothèses que l'on fait sur la physico-chimie de l'adsorption-désorption, plusieurs types de loi sont envisageables :

- La loi de type linéaire (concentrations en phase liquide et solide liées par une relation de proportionnalité) fait appel à l'hypothèse que tous les sites d'adsorption de la matrice poreuse ont la même affinité chimique et que la quantité de produit susceptible

d'être adsorbée par la phase solide est illimitée. Les deux quantités S et C sont liées par la relation :

$$S = K_d C \quad (I.16.a)$$

$$\text{avec } K_d = f_{oc} K_{oc} \quad (I.16.b)$$

$$\text{et } \log K_{oc} = a \log K_{ow} + b \quad (I.16.c)$$

où K_d ($\text{m}^3.\text{kg}^{-1}$) est le coefficient de partition du produit entre l'eau et le sol, f_{oc} (kg.kg^{-1} carbone organique) la fraction de carbone organique dans le sol, K_{oc} ($\text{m}^3.\text{kg}^{-1}$) le coefficient de partition sur le carbone organique et K_{ow} ($\text{m}^3.\text{kg}^{-1}$) le coefficient de partition par rapport à l'octanol. Ce dernier coefficient peut être déduit de l'énergie de transfert du produit de l'eau vers l'octanol (Westall, 1983).

- La loi de type LANGMUIR considère que les sites d'adsorption de la matrice poreuse sont caractérisés par une affinité identique, mais sont en nombre fini. Il existe alors une concentration S_M maximale dans la phase solide qu'il est physiquement impossible de dépasser. L'isotherme d'adsorption (*i.e.* la courbe représentant la relation $S(C)$) suit alors une loi du type :

$$S = S_M \frac{k_L C}{1 + k_L C} \quad (I.17)$$

- La loi de type FREUNDLICH suppose que le nombre de sites d'adsorption est illimité, mais que les affinités de ces sites décroissent lorsque la quantité adsorbée augmente : les sites les plus favorables sont alors occupés en premier et l'adsorption devient plus difficile à mesure que la concentration dans la phase liquide augmente. Elle s'exprime par:

$$S = k_F C^N \quad (I.18)$$

où k_F et N sont deux paramètres à déterminer. Le fait que l'adsorption soit proportionnellement moins importante quand la concentration augmente se traduit par une valeur de N comprise entre 0 et 1.

Il est à noter que les deux dernières lois, lorsque la concentration en phase liquide reste faible, peuvent être assimilées à des lois linéaires. La figure I-3 indique l'allure des courbes $S(C)$ (dites encore isothermes d'adsorption) pour les trois modèles cités précédemment.

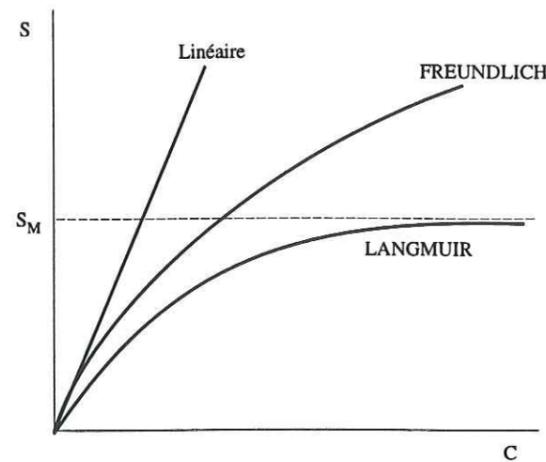


Figure 1-3: Allures des différents isothermes d'adsorption

I-3.3.2. Modèles de type cinétique chimique (NLEA)

La non-conformité de certaines modélisations faisant appel à l'hypothèse L.E.A. par rapport à des expériences conduites en laboratoire sur échantillons ou colonnes de sol (Boesten et al., 1989; Brusseau et al., 1991, ...) conduisent à envisager des lois cinétiques de comportement. De tels modèles de l'adsorption/désorption font alors l'hypothèse qu'il existe au moins une classe de sites pour laquelle l'adsorption subit une limitation, qui se traduit par l'apparition d'un terme cinétique dans les lois d'échange entre phase liquide et phase solide. On expose ci-dessous plusieurs types de modélisations de l'adsorption rencontrées dans la littérature.

- Boesten & Van der Pas (1988), Boesten et al. (1989) présentent une modélisation effectuée comportant deux types de sites d'adsorption, caractérisés par des constantes de temps différentes (l'une étant de quelques minutes, l'autre de quelques heures) et un isotherme de type FREUNDLICH, afin de simuler le devenir de la cyanazine et de la metribuzine. L'expression des concentrations S_1 et S_2 sur les sites de types 1 et 2 respectivement est donnée par :

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} = k_1 (F k_F C^N - S_1) \quad (I.19.a)$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} = k_2 ((1-F) k_F C^N - S_2) \quad (I.19.b)$$

$$\text{avec } S = S_1 + S_2 \quad (I.19.c)$$

F étant la proportion des sites de type 1 dans la matrice poreuse.

- Boesten (1987.b) présente une modélisation utilisant trois types de sites suivant une loi de FREUNDLICH : les sites de type 1 étant caractérisés par une réaction instantanée, alors que le deuxième et le troisième réagissent à l'échelle de la journée et du mois. Ce

modèle a été utilisé pour simuler le comportement de l'ethoprophos. Les relations entre les concentrations sur les trois types de site sont alors données par :

$$S_1 = k_1 C^N \quad (I.20.a)$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} = k_2 (k_F C^N - S_2) \quad (I.20.b)$$

$$\frac{\partial S_3}{\partial t} = k_3 (k_F C^N - S_3) \quad (I.20.c)$$

- Brusseau et al. (1991) modélisent l'adsorption par l'interaction entre deux types de sites, dont seul le premier, qui réagit selon une isotherme linéaire instantanée, est en contact avec la phase liquide. Ce modèle a été appliqué à des composés aromatiques et organochlorés. Les expressions des concentrations S_1 et S_2 sur les sites de type 1 et 2 sont alors:

$$S_1 = F k C \quad (I.21.a)$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} = k_1 S_1 - k_2 S_2 \quad (I.21.b)$$

D'autres modélisations (Van Genuchten et Wierenga, 1976; Brusseau, 1991; Brusseau et al., 1992) introduisent une complexité supplémentaire en décrivant l'eau contenue dans le sol en termes de fraction mobile et immobile et en introduisant un coefficient d'échange cinétique entre ces deux fractions ; le même concept est appliqué aux phases adsorbées.

Bien que le raffinement des modèles permette, dans certains cas, de prendre en compte les phénomènes de déséquilibre liés à l'adsorption/désorption, il implique la nécessité d'une augmentation considérable du nombre de paramètres nécessaires à la description du phénomène. La détermination de ces paramètres nécessite de nombreuses expériences ne conduisant pas toujours à des jeux de valeurs uniques (Ptacek et Gillham, 1992).

Il est en outre probable que les différences des performances offertes par les divers types de modèles, si elles apparaissent flagrantes à l'échelle de la colonne de sol en laboratoire, sont fortement occultées par les effets de la variabilité spatiale des paramètres physico-chimiques lorsqu'il s'agit de modéliser des phénomènes à l'échelle de la parcelle ou du bassin versant, cette variabilité spatiale des caractéristiques du sol étant souvent désignée comme l'origine la plus probable des désaccords entre théorie et expérience (Brusseau, 1991; Boesten et Van der Linden, 1991; Boesten, 1991). Ainsi, dans plusieurs codes de calcul (e.g. RUSTIC, LEACHM, MOC), l'adsorption/désorption est modélisée de façon simple en faisant appel à des hypothèses de type L.E.A., en incorporant des lois de type linéaire ou FREUNDLICH.

I-3.3.3. Ecriture simplifiée de l'équation du transport en présence d'adsorption

Lorsque l'adsorption intervient seule, et que le phénomène de volatilisation peut être négligé (comme c'est le cas dans la zone saturée par exemple ou pour un produit peu volatil), l'équation du transport peut être écrite sous la forme simplifiée:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_d S + \theta C) = \text{Div} (-V_d C + \theta D \text{Grad} C) + Q_s \quad (I.22)$$

Afin de ne conserver qu'une seule variable dans cette équation, on introduit la grandeur adimensionnelle nommée facteur retard et notée R dans ce mémoire:

$$R = 1 + \frac{\rho_d S}{\theta C} \quad (I.23)$$

Ce facteur retard est toujours supérieur à 1. Un facteur retard égal à 1 signifie que le phénomène d'adsorption est inexistant. L'équation du transport devient alors:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\theta R C) = \text{Div} (-V_d C + \theta D \text{Grad} C) + Q_s \quad (I.24)$$

La signification du facteur retard apparaît dans (I.24): l'apparition dans le membre gauche de l'équation d'un facteur supérieur à 1 traduit une diminution de l'influence du transport et des termes sources. D'un point de vue physique, cela signifie que la progression des fronts de concentration est ralentie par rapport à une situation d'adsorption inexistante. En effet, une partie de l'espèce en solution, qui normalement se déplacerait à la vitesse interstitielle de l'eau, est adsorbée au fur et à mesure qu'elle rencontre une matrice non contaminée: le front de concentration est donc animé d'une vitesse inférieure à celle de l'eau. On trouve ici la raison de l'appellation "facteur retard".

En particulier, dans le cas d'une adsorption linéaire instantanée, le facteur retard s'exprime:

$$R = 1 + \frac{\rho_d K_d}{\theta} \quad (I.25)$$

Il est alors indépendant de la concentration.

Une adsorption instantanée de type LANGMUIR donne:

$$R = 1 + \frac{\rho_d k_L S_M}{\theta (1 + k_L C)} \quad (I.26)$$

Dans ce cas, le facteur retard varie entre 1 (lorsque la concentration en phase liquide tend vers l'infini) et une valeur $R_{\max} = 1 + \rho_d k_L S_M / \theta$.

Une loi de type FREUNDLICH donne en revanche:

$$R = 1 + \frac{\rho_d K_F C^{N-1}}{C} \quad (I.27)$$

Lorsque la concentration en phase liquide tend vers 0, le facteur retard tend alors vers l'infini, ce qui signifie par exemple qu'un nuage de concentration arrivant dans une eau initialement pure ne pourrait pas s'y déplacer: le facteur retard doit donc être limité artificiellement pour éviter des situations physiquement irréalistes.

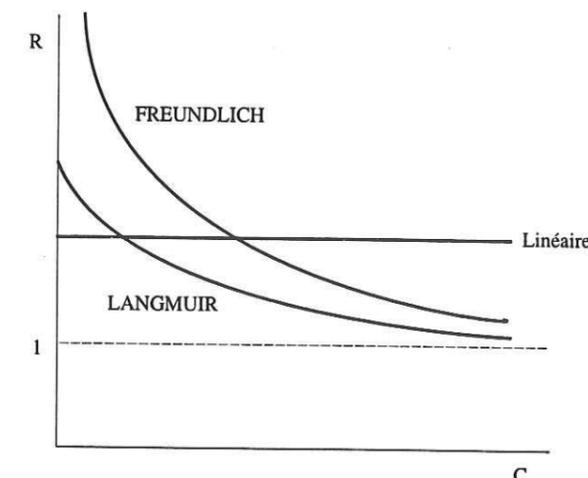


Figure I-4: Evolution du facteur retard en fonction de la concentration en phase liquide pour différentes modélisations de l'adsorption instantanée

Par rapport à l'hypothèse d'adsorption linéaire, les formulations de type LANGMUIR et FREUNDLICH traduisent le fait que, plus un polluant est concentré, plus sa progression est rapide. L'hypothèse d'adsorption linéaire tend donc à surestimer les durées de transfert comparativement aux deux autres formulations.

I-3.4. Répartition entre phases liquide et gazeuse

La volatilisation des produits à l'intérieur du sol se produit dans la zone non saturée ; l'on considère généralement que l'air est immobile dans la matrice poreuse et que la concentration du produit en phase gazeuse C_{air} (g.l^{-1}) et sa concentration en solution sont liées par une relation de HENRY:

$$C_{\text{air}} = K_H C \quad (I.28)$$

où K_H (adimensionnel) est la constante de Henry. Dans certaines conditions, la volatilité du produit phytosanitaire peut revêtir une influence importante sur ses propriétés de mobilité : la présence d'un pic d'humidité dans une colonne de sol peut avoir pour effet de limiter la diffusion d'un produit très volatil vers les couches plus profondes (Culver et al., 1991).

Dans le cas où la volatilisation du produit est prise en compte, la formulation du facteur retard est modifiée:

$$R = 1 + \frac{\rho_d S}{\theta C} + \frac{(\eta - \theta) K_H}{\theta} \quad (I.29)$$

Ce qui permet de conserver la formulation (I.24)

I-3.5. Termes sources/dégradation

La dégradation ou la filiation d'un produit ont pour effet d'induire sa disparition graduelle, sous forme de résidus (dégradation) ou sous forme de composés actifs (filiation). La dégradation d'un produit phytosanitaire est due à deux types de mécanismes : les mécanismes de nature biologique et les mécanismes abiotiques.

La dégradation d'origine biologique est due à l'existence dans le sol de populations bactériennes. Dans la zone non saturée sont surtout présentes les espèces aérobies, alors que les aquifères comprennent uniquement les espèces anaérobies. Moins actives et/ou moins nombreuses que les populations aérobies, celles-ci ont une action beaucoup moins importante sur les produits phytosanitaires. L'activité bactérienne dépend de facteurs comme le pH du sol et la température.

La dégradation abiotique est due à plusieurs phénomènes : photodécomposition par les rayonnements ultraviolets, réactions d'oxydoréduction (principalement l'hydrolyse - Calvet, 1977), dégradation par les matières organiques (notamment par leurs fonctions acides) ou par les argiles.

Les lois de dégradation/filiation des produits phytosanitaires sont modélisées, en règle générale, par des cinétiques d'ordre 1 sur les concentrations de produit en phase liquide (codes de calcul LEACHM-P, MOC). De telles lois font explicitement appel à l'hypothèse que le taux de dégradation d'un produit phytosanitaire n'est fonction que de la quantité de ce produit disponible dans le sol et que l'activité des acteurs de cette dégradation en est indépendante. Dans certains cas cependant, l'activité des populations bactériennes peut dépendre des apports en produits phytosanitaires déjà effectués. Hendry et Richardson (1988) mentionnent un accroissement des taux de dégradation de produits phytosanitaires lorsque le sol a été traité avec ces mêmes produits plusieurs semaines auparavant. Des simulations numériques du transport (Chen et al., 1992) prenant en compte l'évolution de la population microbienne dans le temps ont permis de montrer une meilleure adéquation de la modélisation par rapport à l'expérience; les formulations faisant intervenir de tels mécanismes sont toutefois lourdes et mettent en jeu un nombre important de paramètres, que l'on ne peut pas forcément aisément déterminer de façon indépendante.

Dans l'hypothèse où des lois cinétiques d'ordre 1 sont adoptées pour la dégradation, le terme source Q_s de l'équation (I.24) est donné par:

$$Q_s = \theta \left(\sum_{m=1}^{N_p} \Lambda_m C_m - \lambda C \right) + Q_{\text{apport}} \quad (I.30)$$

où N_p est le nombre de produits mères, c'est à dire susceptibles de donner, par dégradation ou réaction, le produit considéré, Λ_m (s^{-1}) le taux de dégradation du m-ième produit mère, C_m ($kg.m^{-3}$) sa concentration en phase liquide, λ (s^{-1}) le taux de dégradation du produit phytosanitaire considéré et Q_{apport} ($kg.m^{-3}.s^{-1}$) les apports extérieurs en produit (exemples: injection ponctuelle de produit, prélèvement racinaire,...).

L'équation complète du transport (I.24) devient alors:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\theta R C) = \text{Div} (-V_d C + \theta D \text{Grad} C) + \theta \left(\sum_{m=1}^{N_p} \Lambda_m C_m - \lambda C \right) + Q_{\text{apport}} \quad (I.31)$$

I-3.6. Equation du transport utilisée dans le cadre de la thèse

Nous avons posé dans nos travaux les limitations et hypothèses suivantes:

- nous nous intéressons (Cf. chapitres III et IV) à des produits mères et non à des métabolites. Ainsi, le terme source/puits se réduit à:

$$Q_s = -\lambda \theta C + Q_{\text{apport}} \quad (I.33)$$

- nous avons adopté l'hypothèse d'une adsorption instantanée linéaire, ce qui conduit à un facteur retard indépendant de la concentration, et donné par (I.29).

L'équation du transport complète s'écrit alors:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left([\theta + \rho_d K_d + (\eta - \theta) K_H] C \right) = -\text{Div} (V_d C - \theta D \text{Grad} C) - \lambda \theta C + Q_{\text{apport}} \quad (I.34)$$

C'est cette dernière équation que nous utiliserons dans les chapitres III et IV.

I-4. LES OUTILS DE MODELISATION : ETAT DE L'ART

I-4.1. Vocabulaire et notions liés à la modélisation

Modélisation

La modélisation est le fait de représenter de façon simplifiée une réalité complexe dont l'état est décrit en termes de variables, de lois d'évolution et de paramètres.

Modèle mathématique

Un modèle mathématique est la représentation, par des relations mathématiques entre divers paramètres et variables, des processus liant les éléments du système réel que l'on étudie. La modélisation mathématique d'une réalité donnée passe par plusieurs étapes:

- traduction des phénomènes physiques en termes mathématiques (données et lois d'évolution): c'est par exemple de cette manière que l'on décrit les écoulements dans les zones non saturée et saturée du sol par les lois de Richards et de Darcy;
- résolution (à condition que la solution existe) des problèmes posés en termes mathématiques (la plupart du temps, des équations différentielles ou aux dérivées partielles). Si les problèmes mathématiques ne peuvent pas être résolus analytiquement, une résolution approchée est nécessaire. Une étape supplémentaire doit être effectuée:
- traduction du problème mathématique en un problème approché et obtention d'une solution approchée. Ce domaine est celui de l'analyse numérique;
- traduction de la solution obtenue en termes physiques, consistants avec la réalité.

La figure I-5 ci-dessous illustre ces différentes étapes.

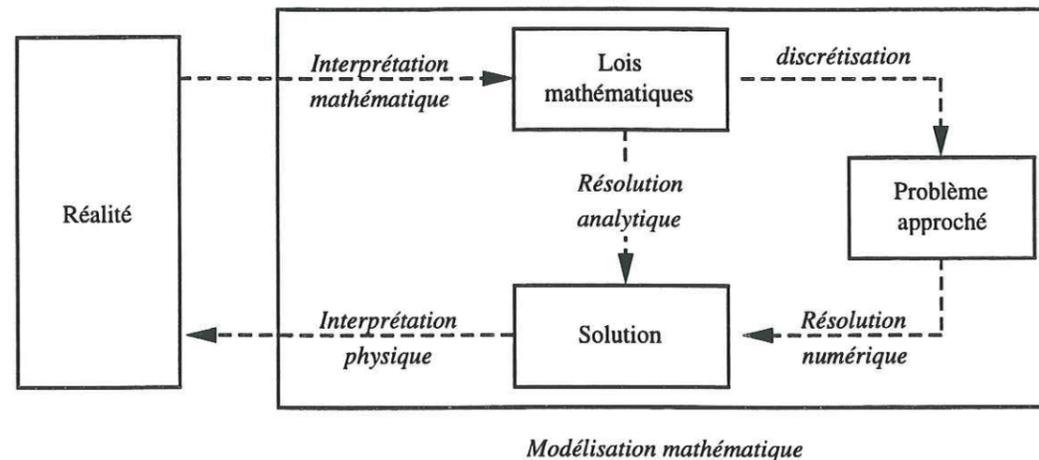


Figure I-5: les étapes de la modélisation mathématique

Remarque: il est possible que les problèmes mathématiques résultant de la traduction du problème physique n'aient pas de solution. On citera par exemple les problèmes inverses, qui peuvent se révéler être des problèmes "mal posés" (Yeh, 1987; Yen, 1989). Dans ce cas, l'absence de solution doit aussi être considérée comme un résultat: elle mène souvent à

reconsidérer la traduction mathématique des phénomènes, afin de définir un problème mathématique soluble.

Paramètre

Un paramètre est une quantité variable dans le temps et/ou dans l'espace, définie par le modélisateur. Un paramètre peut être modifié par l'utilisateur, de façon à "régler" le modèle.

Variable

Une variable est une quantité dépendant du temps et éventuellement de l'espace, représentative de l'état du système (variable d'état) que l'on cherche à modéliser ou des forçages (variable d'entrée) qui lui sont appliqués. Les variables d'entrée, extérieures au système modélisé, sont fournies au modèle à partir de résultats de mesures physiques. Contrairement aux paramètres, elles ne peuvent être réglées. Les variables d'état sont calculées par le système de modélisation.

Réglage

Le réglage est le fait d'ajuster les paramètres incertains du modèle pour que, dans une situation connue d'évolution du système physique modélisé, les valeurs des variables d'état calculées par le modèle soient aussi proches que possible des valeurs mesurées. En général, les jeux de paramètres obtenus par réglage ne sont pas uniques, et peuvent dépendre des critères adoptés pour le réglage. Par rapport à une détermination directe de paramètres en laboratoire (exemple: essais de perméabilité sur une colonne de sol), le réglage se distingue par les deux caractéristiques suivantes:

- en situation réelle, le modélisateur ne maîtrise pas les variables d'entrée (forçages);
- il ne maîtrise pas les conditions de l'expérience: il peut alors se produire plusieurs phénomènes différents, découplés ou non, qui ne sont pas ceux qu'il désire caractériser, et qui ont une influence sur les variables de sortie. Ne pouvant être isolés du phénomène auquel on s'intéresse, ils induisent alors une incertitude sur le paramètre que l'on veut régler.

Validation

La validation est le fait de vérifier l'adéquation entre variables simulées et mesurées. Lorsque des paramètres ont été déterminés par le biais d'un réglage, la période sur laquelle on valide le modèle doit être différente de celle qui a servi au réglage. Les forçages apparaissant dans la période de réglage doivent également entrer dans la gamme de valeurs pour lesquels le modèle a été réglé (un modèle considéré satisfaisant pour la prévision de crues peut se révéler très

mauvais pour des prévisions d'étiage). En nous appuyant sur l'expérience de modélisation hydrologique que nous avons acquise au cours de cette thèse, en partant des définitions données par Beck (1987) et Kauark-Leite (1990), nous proposons les critères suivants pour juger un modèle comme validé:

- a) les paramètres d'un modèle validé obéissent à une loi connue d'évolution dans le temps;
- b) dans le cas où ils sont fortement variables dans l'espace, ces paramètres peuvent être décrits de façon satisfaisante par leurs propriétés statistiques (Cf. chapitre IV): loi de distribution et structure spatiale;
- c) les écarts résiduels entre variables observées et simulées doivent être faibles devant la variance des variables observées et ne doivent pas résulter d'un processus non aléatoire;
- d) le critère de validation doit être représentatif des - et sensible aux - phénomènes importants pour la modélisation.

On regroupe, sous le vocable de phénomènes importants pour la modélisation, les deux classes suivantes:

- les phénomènes qui influent, lors de la modélisation, de manière significative sur la variable examinée;
- les phénomènes dont la représentation correcte est indispensable pour obtenir des variations correctes de la variable examinée.

Les méthodes utilisées pour estimer la validité d'un modèle sont décrites et employées dans l'annexe III à ce mémoire.

Pour résumer, un modèle peut être représenté (Vauclin, 1994) par une relation du type:

$$Y = F(X_i, a_j) + \varepsilon \quad (I.35)$$

où Y représente les variables de sortie, X_i les variables d'entrée, a_j les paramètres et ε l'erreur commise en identifiant la réalité au modèle. De la nature de cette relation dépend la nature du modèle ou de l'outil de modélisation auquel on s'intéresse. Le paragraphe I-4.2. a pour objet les critères de classification des modèles existants.

I-4.2. Critères de classification des outils de modélisation

Les outils de modélisation peuvent être caractérisés par trois problématiques (Vauclin, 1994): la nature mathématique des variables d'entrée X_i et des paramètres a_j ; celle de la relation F qui les lie aux variables de sortie Y; enfin, le degré de précision avec lequel les processus sont décrits dans ces modèles.

Nature des variables d'entrée et des paramètres

Lorsque les variables d'entrée et les paramètres caractérisent la réalité de façon univoque (pour décrire la réalité, il n'y a qu'une seule valeur possible d'un paramètre ou d'une variable donnée), le modèle est dit déterministe.

Lorsque ces variables et paramètres sont considérés comme appartenant à des fonctions aléatoires, le modèle est dit stochastique.

On notera que le caractère déterministe ou stochastique d'un modèle n'est pas lié à un outil de modélisation en particulier, mais à l'utilisation que l'on fait de cet outil.

Nature de la relation aux variables de sortie

Un modèle est dit conceptuel lorsque la relation F est fondée sur une certaine connaissance et sur la description des processus modélisés (exemple: modèle de transport faisant intervenir l'équation (I.34)).

Lorsque ce modèle est fondé sur des relations expérimentales, il est dit empirique (exemple: loi de Darcy telle que ce dernier l'a établie en 1856).

Description de la réalité

Un modèle est dit mécaniste lorsque la relation F traite de façon distincte des phénomènes physiques et des milieux distincts (exemple: l'équation (I.34) opère un traitement distinct sur les phénomènes de convection, diffusion, dégradation, et d'adsorption). En règle générale, ces modèles sont fondés sur des descriptions en termes de flux de matière (eau, soluté) et/ou d'énergie (température). Leur description fine des processus permet d'effectuer des études de sensibilité et de prévoir l'impact d'éventuelles modifications du milieu. En revanche, ils font intervenir de nombreux paramètres pour lesquels le modélisateur ne dispose pas toujours de mesures.

Un modèle est fonctionnel lorsqu'il utilise une description globale des phénomènes et/ou des milieux. Ces modèles sont de type capacitif (modèles réservoirs par exemple). De tels modèles font souvent appel à des solutions analytiques (De Smedt et Wierenga, 1978). Ils présentent l'avantage de la simplicité (nombre réduit de paramètres et de variables d'entrée), mais ne peuvent prédire l'impact d'une modification du milieu naturel.

Les outils de modélisation existants sont conçus pour exploiter un type de modèle appartenant aux catégories ci-dessus. C'est pourquoi nous reprendrons, dans l'état de l'art ci-dessous, la même classification pour les outils de modélisation que pour les modèles.

I-4.3. Outils déterministes

I-4.3.1. Outils déterministes mécanistes

Les outils déterministes mécanistes de modélisation du transport en milieu souterrain tiennent compte en général des phénomènes physiques suivants :

Les phénomènes de transport représentés sont la convection et la diffusion. (*e.g.* logiciel MOC [Konikow and Bredehoeft, 1978]).

Les phénomènes physico-chimiques pris en compte sont les suivants : adsorption du soluté sur la matrice poreuse, volatilisation dans la fraction gazeuse (dans le cas de la zone non saturée) et dégradation des composés par les micro-organismes contenus dans le sol.

La plupart des logiciels de calcul du transport en milieu souterrain font appel à l'hypothèse LEA (voir § I-3.2.). Les concentrations en phase liquide et dans la matrice poreuse sont alors reliées par une loi de type linéaire ou de Freundlich.

Le phénomène de volatilisation n'est pris en compte que dans les logiciels de calcul du transport dans la zone non saturée. La concentration en phase gazeuse et la concentration en phase liquide d'un produit donné sont alors liées par la loi de HENRY (Cf. § I-3.3.).

Le phénomène de dégradation ou de réaction de produits entre eux sont modélisés par des lois cinétiques d'ordre 1 (Cf. § I-3;4;). On citera les logiciels LEACHMP [Wagenet and Hutson, 1989] et MOC [Konikow and Bredehoeft, 1978]).

En règle générale, les écoulements et le transport dans la zone non saturée sont modélisés suivant un schéma unidimensionnel vertical, alors que dans la zone saturée, ils sont modélisés en général dans un plan horizontal. Certains logiciels permettent la modélisation couplée entre zone saturée et zone non saturée ; ces logiciels sont rares, la plupart des outils étant destinés au calcul dans l'un ou l'autre milieu.

Outils de modélisation dans la zone non saturée seule

Les écoulements dans la zone non saturée sont régis par la différence de potentiel hydrique engendrée par les différences de teneur en eau, ainsi que par la gravité. C'est pourquoi, dans le cas où la pente du terrain est faible et où les apports en eau dans le plan horizontal sont relativement homogènes, les écoulements peuvent être considérés comme verticaux. Les codes de calcul du transport de soluté dans ce milieu travaillent alors dans une configuration unidirectionnelle verticale. L'hydrodynamique peut être calculée en faisant appel à l'équation de Richards, ou à des bilans simplifiés du transfert de l'eau dans le sol.

On donne ci-dessous des exemples de logiciels de calcul du transport dans la zone non saturée.

- * GLEAMS (Leonard et al., 1987; Leonard et al., 1990) : Le bilan hydrique est calculé de manière simplifiée. Les mécanismes pris en compte sont le prélèvement racinaire de l'eau et des produits et la dégradation (par une loi cinétique du premier ordre). Il est possible de suivre l'évolution simultanée de plusieurs produits. La génération aléatoire d'épisodes pluvieux est possible.
- * LEACHMP (Wagenet & Hutson, 1989) utilise l'équation de Richards pour la description des écoulements. La résolution des équations de l'hydrodynamique et du transport est effectuée suivant une méthode aux différences finies. Il prend également en compte l'extraction racinaire de l'eau et des produits phytosanitaires par les plantes, ainsi que la volatilisation. Il est possible de simuler l'évolution simultanée de plusieurs produits et de leurs métabolites. Le pas de temps de calcul est variable, déterminé en fonction des données météorologiques disponibles.
- * PRZM (Carsel et al, 1985) fait appel à un bilan de masse simplifié pour le calcul de l'hydrodynamique. Les cinétiques de réaction prises en compte peuvent obéir à des lois autres que des cinétiques de premier ordre; les paramètres du modèle peuvent être variables dans le temps.

Outils de modélisation dans la zone saturée seule

Les écoulements dans la zone saturée sont en général modélisés dans un plan horizontal. Des logiciels existent toutefois, qui tiennent compte des mouvements suivant la verticale (effets de stratification).

- * MOC (Konikow & Bredehoeft, 1978) résout les équations du transport dans un plan horizontal. Les phénomènes modélisés sont la convection (par une méthode de suivi de particules associée à la méthode des caractéristiques), la diffusion (par un schéma aux différences finies explicite), la dégradation et l'adsorption. L'adsorption fait appel à l'hypothèse "LEA", avec des isothermes linéaires ou de type Freundlich ; la dégradation des produits phytosanitaires est modélisée par une loi cinétique d'ordre 1. Il est possible de prendre en compte des injections ou des pompages, ainsi que des recharges diffuses ou des infiltrations à partir des eaux de surface.

Outils de modélisation couplée des zones saturée et non saturée

Ces outils sont de deux sortes : certains réalisent un couplage entre deux modèles de géométrie différente (modèle unidirectionnel dans la zone non saturée et bidirectionnel dans la zone saturée); d'autres sont intégralement bidirectionnels ou tridirectionnels et prennent pour base la résolution des mêmes équations dans les deux domaines. Ces derniers ne sont en général pas dédiés à la modélisation du devenir des produits phytosanitaires, c'est pourquoi nous n'en présentons pas d'exemple.

- * **RUSTIC** (Dean et al., 1989) comporte trois modules : le module PRZM pour la zone racinaire, un module de calcul dans la zone non saturée et un module de calcul dans la zone saturée. Le module de calcul dans la zone non saturée fait appel à l'équation de Richards pour les bilans hydriques ; convection, dispersion et dégradation sont prises en compte et calculées par une méthode du type éléments finis. Le module de calcul dans la zone saturée permet une modélisation bidirectionnelle horizontale, verticale ou une modélisation axisymétrique.

I-4.3.2. Outils déterministes fonctionnels

Ces modèles ne s'attachent pas au calcul du transport dans un seul milieu physique particulier. Ils sont utilisés dans le cas de simulations à l'échelle du bassin versant. Ces modèles effectuent également une modélisation de l'hydrologie et du transport fondée sur des hypothèses ou des descriptions simplificatrices des processus physiques.

- * **ARM** : ce modèle global est conçu pour être appliqué à des bassins versants de superficie inférieure à 5 km². Le couplage entre modules hydrologique et chimique fait intervenir l'hypothèse de mélange parfait. Le prélèvement de l'eau et des produits par les plantes est modélisé, ainsi que l'adsorption, qui suit une loi cinétique linéaire.
- * **CREAMS** (Knisel, 1980) est un outil de modélisation de type global conçu pour le calcul à l'échelle de petits bassins versants (quelques kilomètres carrés). Il fait l'hypothèse que les produits actifs sont concentrés dans la couche superficielle du sol (le 1er cm.), à partir de laquelle ils peuvent être entraînés dans les eaux de surface ou s'infiltrer en direction des couches profondes du sol. La dégradation des produits phytosanitaires est modélisée par une loi cinétique linéaire et l'adsorption fait appel à l'hypothèse d'isotherme linéaire.

I-4.4. Outils stochastiques

Le caractère statistique de ces outils a pour rôle de tenter de tenir compte des incertitudes liées à la connaissance des caractéristiques des milieux. Parmi ces outils, il est possible de distinguer deux classes: les outils de type déterministe, que l'on utilise dans le cadre de simulations de Monte Carlo, ou des outils purement stochastiques.

I-4.4.1. Outils déterministes utilisés dans un contexte stochastique

Ces modèles permettent de générer aléatoirement des données suivant des lois de distribution particulières, afin de déduire des lois de distribution des variables de sortie. L'on peut citer le cas du logiciel RUSTIC, qui comporte un module permettant de mettre en oeuvre cette méthodologie de façon automatique (simulations de type Monte Carlo).

I-4.4.2. Modèles statistiques mécanistes

Des traitements statistiques des équations du transport (Bresler & Dagan [1979, 1981, 1983] pour la zone non saturée; Dagan [1982], Gelhar and Axness [1983] pour les aquifères) permettent de décrire le transport de soluté en termes statistiques; les paramètres gouvernant l'hydrodynamique et le transport (en particulier conductivité hydraulique et la dispersivité hydrodynamique) étant considérées comme des fonctions aléatoires pourvues d'une structure définie. Le champ de concentration résultant du transport est également considéré comme une variable aléatoire dont les moments peuvent être calculés.

Le tableau ci-dessous résume les caractéristiques des logiciels cités:

	Modèles déterministes	Modèles stochastiques
Modèles fonctionnels	ARM CREAMS	
Modèles mécanistes	GLEAMS LEACHP PRZM-RUSTIC	RUSTIC (module spécifique) modèle de Dagan

Tableau I-1 : principaux outils existants pour la modélisation du devenir des produits phytosanitaires

On remarquera, avec Pennel et al. (1990), que le choix d'un outil de modélisation doit être déterminé à la fois par les objectifs de la modélisation (usage à destination scientifique, à des fins d'enseignement ou de gestion), par les données nécessaires - et celles qui sont *effectivement disponibles* - au modèle, des phénomènes modélisés (simulation du

comportement d'un ou de plusieurs métabolites, etc...) et par les paramètres dont on désire pouvoir estimer l'influence sur les résultats de modélisation.

I-5. LES INCERTITUDES LIEES A LA MODELISATION

S'il est possible, à l'échelle métrique (colonne de sol en laboratoire), de déterminer des constantes physiques (perméabilité du sol, porosité) ou physico-chimiques (constantes d'adsorption, durées de demi-vie de composés dégradables) homogènes, il n'en est plus de même à l'échelle de la parcelle ou du bassin versant : les paramètres relatifs aux lois d'évolution ou de transport des produits sont souvent caractérisés par une hétérogénéité marquée, dont l'échelle caractéristique est de l'ordre du mètre ou de la dizaine de mètres (Boggs et al., 1992). La variabilité spatiale de ces caractéristiques doit pouvoir être représentée dans les modélisations de l'évolution des produits phytosanitaires à grande échelle.

I-5.1. Influence de la variabilité spatiale des caractéristiques du milieu sur les quantités infiltrées

Harrison et al. (1992) ont montré, en procédant à des simulations numériques de transport de polluants dans des milieux peu perméables fracturés, que l'hétérogénéité d'un sol accroît la vitesse d'infiltration des produits lâchés en surface, du fait de l'existence de cheminements préférentiels. Le temps de résidence des produits phytosanitaires entre la surface du sol et l'aquifère étant réduit, ces produits auront subi une dégradation moins importante et présenteront par conséquent des concentrations supérieures dans l'aquifère.

L'influence de la variabilité des caractéristiques du sol sur les résultats de simulations a été soulignée par divers travaux (Boesten, 1991; Tracy, 1992). De façon générale, il apparaît que prendre en compte une hétérogénéité du sol conduit à calculer des quantités infiltrées supérieures à celles que donnent des calculs basés sur des caractéristiques moyennées uniformes. D'autres calculs (Leistra, 1985) montrent également qu'une variabilité spatiale des écoulements induit également l'accroissement des quantités infiltrées.

I-5.2. Influence de la variabilité spatiale des caractéristiques du milieu sur les propriétés de transport

La variabilité spatiale des propriétés du milieu exerce une influence non négligeable sur les choix de modélisation du transport à l'échelle de la parcelle ou du bassin versant. Les superficies prises en compte (plus de 1000 km² pour le bassin versant du Grand Morin, site

d'application présenté en seconde partie de ce rapport) ne permettent pas en effet de modéliser les phénomènes avec des résolutions plus fines que le kilomètre carré, tant pour des raisons de temps de calcul que de disponibilité et de précision des données relatives aux sites étudiés. Le problème est alors de pouvoir dégager, à partir des caractéristiques du milieu réel, dont la taille des hétérogénéités est de l'ordre du mètre, des propriétés équivalentes utilisables par un modèle dont la finesse de résolution est le kilomètre carré.

Les campagnes de mesure sur site des effets de dispersion de solutés dans les eaux souterraines font apparaître en particulier qu'il est souvent impossible de modéliser la dispersion des traceurs par une loi de Fick à diffusivité constante, la taille du nuage augmentant plus rapidement avec la distance au point d'injection que ne le prévoit le modèle théorique (De Marsily, 1991 ; Jensen et Refsgaard, Personal Communication) : il existe ainsi une différence entre les coefficients de dispersion mesurés à l'échelle du laboratoire et ceux déduits des expériences à l'échelle du site. Adams et Gelhar (1992) montrent, à partir des résultats d'une étude de traçage sur site que les valeurs calculées de la dispersivité longitudinale macroscopique sont augmentées lorsque l'écoulement est non-uniforme. A des échelles hectométriques ou supérieures, il semble que l'effet de dispersion cinématique soit contrôlé principalement par les hétérogénéités des écoulements plutôt que par les propriétés microscopiques du milieu poreux.

Chrysikopoulos et al. (1992) montrent, dans le cadre d'une étude théorique portant sur un milieu idéal caractérisé par des propriétés hydrauliques et physico-chimiques périodiques dans l'espace, que la diffusivité macroscopique dépend alors des valeurs moyennes et des périodes spatiales de la vitesse V_i et du facteur de retard R . Il faut toutefois souligner que les valeurs macroscopiques ne sont en pratique pas utilisables pour des calculs portant sur de faibles distances de trajet ; la théorie ayant permis de les déduire fait en effet appel à l'hypothèse selon laquelle le nuage de traceur a couvert une distance suffisante pour couvrir toute la plage de variation des paramètres hydrauliques et physiques, et permettre ainsi le traitement statistique (De Marsily, 1991 ; Destouni, 1992 ; Germann, 1991). Chrysikopoulos et al. (1992) mentionnent à ce sujet des durées de trajet correspondant à plusieurs dizaines d'années pour le dichlorobenzène. Une étude du même type menée par Valocchi (1989, cité par Chrysikopoulos et al.), indique que cette durée, dite durée de relaxation, augmente lorsque l'on introduit la non-linéarité dans la loi de comportement du phénomène d'adsorption. Chrysikopoulos et al. (1992) donnent une expression de cette durée de relaxation τ_r :

$$\tau_r \propto \frac{L^2 \bar{R}}{\bar{D}} \quad (I.36)$$

\bar{D} étant la valeur moyenne de la diffusivité, L l'échelle de périodicité des hétérogénéités et \bar{R} la valeur moyenne du facteur de retard.

I-5.3. Modélisation et prévention de risque

Outre les problèmes liés à l'incertitude sur les paramètres et à l'acquisition des données, la modélisation perd de sa pertinence en tant qu'outil de prévision lorsque l'état initial du système et les apports en contaminant sont inconnus. Ce cas est malheureusement fréquent dès que l'on traite des pollutions diffuses par les produits destinés aux usages agricoles: les apports ont eu lieu pendant des durées très longues, en utilisant des produits différents en quantités généralement inconnues, dans des réservoirs naturels de très grande étendue. Et même à l'heure actuelle, il est difficile de déterminer le mode d'utilisation exact des produits phytosanitaires: ainsi, un épandage diffus de produits peut très vite se transformer en pollution ponctuelle dans le cas du renversement d'une citerne. L'exploitant agricole responsable d'une telle pollution ne la signale généralement pas.

Aussi, il semble plus pertinent d'utiliser les outils de modélisation pour aider à *prévenir* les pollutions d'origine agricole, c'est-à-dire de minimiser les risques de contamination des captages. C'est dans cette optique de prévention que sont établis des périmètres de protection des captages d'eau potable et c'est cette orientation que nous avons choisie pour nos travaux. La volonté de protéger une ressource donnée conduit en général à déterminer dans quelle mesure cette ressource est exposée à un risque de contamination et comment ce risque peut être abaissé jusqu'à un certain niveau. Nous allons voir dans le paragraphe suivant que la notion de risque de contamination de la ressource en eau est souvent ramenée à celle de sa vulnérabilité.

I-6. RISQUE ET VULNERABILITE: REVUE BIBLIOGRAPHIQUE

I-6.1. Les notions de risque et de vulnérabilité

I-6.1.1. Risque

La notion de risque et son analyse ont été introduites au début du siècle, à l'origine dans le contrôle de la qualité des produits industriels (Yen, 1989). Il existe plusieurs acceptions pour le mot "risque"; nous adoptons dans ces pages la définition suivante:

Le risque associé à une activité est la probabilité pour que les objectifs assignés au produit de cette activité ne soient pas remplis, dans des conditions normales de fonctionnement.

Exemple: le risque associé à la présence d'un barrage est la probabilité pour que, dans les circonstances normales de remplissage de ce barrage, sa résistance soit inférieure à la charge qu'il doit supporter.

Ainsi, le risque considéré dans nos travaux sera celui de la contamination des captages en aquifère par des produits phytosanitaires.

L'expression mathématique qui définit le risque \mathcal{R} est la suivante (Yen, 1989):

$$\mathcal{R} = \text{Prob}(X_0 \leq X_T) \quad (I.37)$$

où X_0 est une variable représentant l'objectif assigné (dans notre cas: concentration maximale tolérée dans les eaux de captage) et X_T représente l'état de réalité (dans notre cas: concentration effectivement mesurée dans les eaux de captage).

On notera qu'une autre définition du risque, est la suivante:

$$\mathcal{R} = C_T \text{ Prob}(X_0 \leq X_T) \quad (I.38)$$

où C_T est le coût (humain, matériel, financier...) induit par l'apparition de l'événement indésirable ($X_0 \leq X_T$). Cette définition sera examinée dans le chapitre IV de ce mémoire (Cf. § IV-1.2.). Dans le présent chapitre, nous ne considérerons que la définition (I.37).

Dans le cadre de nos travaux, le point-clé de l'estimation du risque est la détermination de la variable X_T qui caractérise l'état de réalité. Pour estimer cette variable, nous avons choisi une approche de modélisation se traduisant par la relation formelle suivante:

$$X_T = f_T(M, v, p) \quad (I.39)$$

où M est l'outil de modélisation utilisé, v les variables de forçage de la modélisation (conditions aux limites de l'hydrologie et du transport), p les paramètres de modélisation et f_T la fonction de transfert associée.

Il arrive souvent (Yen, 1989) que la variable X_T soit considérée comme une variable aléatoire, en raison des incertitudes qui se rattachent à sa détermination. Ces incertitudes peuvent être classées en quatre catégories, suivant leur nature:

- incertitude "naturelle" : les processus naturels peuvent revêtir un caractère aléatoire, ce qui ressort sur la manière dont ils seront pris en compte dans la modélisation: cette incertitude entraîne une incertitude sur les paramètres du modèle;
- incertitude liée à la modélisation (inadéquation entre la réalité des phénomènes physiques et leur description par le système de modélisation);
- incertitude sur les données mesurées (erreurs de mesure, de transmission des résultats de mesure,...)
- incertitude "opérationnelle" (dégradation d'origine humaine des propriétés du milieu, qui ne peut pas être prise en compte dans la modélisation.)

L'approche préventive, qui part pour hypothèse d'un état "de base" donné, non dégradé et où les données sont non entachées d'erreur, permet d'éliminer les deux derniers points: c'est pourquoi elle est largement employée à l'heure actuelle. Nous verrons dans le paragraphe suivant que la notion de vulnérabilité permet en outre d'éliminer une incertitude supplémentaire, l'incertitude sur les quantités de produit apportées aux systèmes naturels.

I-6.1.2. Vulnérabilité

Dans le domaine de la protection des ressources en eau, l'usage (Foster, 1987) est de définir le risque de contamination comme une fonction (non obligatoirement numérique) de la "pression de pollution" (*i.e.* les quantités de produit épandues sur les cultures) et de la vulnérabilité de cette ressource en eau.

La vulnérabilité est, au sens courant, le caractère vulnérable (*i.e.* qui peut être facilement atteint, qui se défend mal) d'un objet, ou encore sa fragilité, cette dernière étant la facilité à être altéré, détérioré, détruit (Robert, 1991). Cette notion fait donc intervenir celle de sensibilité aux perturbations extérieures. En particulier, la vulnérabilité des aquifères a été définie de diverses manières par différents auteurs (Civita, 1993), sans être vraiment rattachée à un contexte mathématique formel.

Dans le cadre de la définition (I.37), si l'on désigne par PP la pression de pollution et V la mesure de la vulnérabilité de la ressource en eau, le risque de contamination est défini par:

$$R = \text{Prob}(X_o \leq X_r(PP.V)) \quad (I.40)$$

la variable $X_r(x)$ étant une fonction croissante de x . Ainsi, pour que le risque de contamination reste à un niveau acceptable, la pression de pollution doit être plus faible aux endroits où la vulnérabilité augmente. On notera cependant que, si la définition (I.40) relie théoriquement le risque et la vulnérabilité, il n'en va pas de même sur le plan pratique. En effet, pour pouvoir effectivement déterminer le risque de contamination de la ressource en eau à partir de la pression de pollution et de la vulnérabilité, il faut pouvoir déterminer la relation mathématique entre la fonction $X_r(x)$ et son argument x . Aucune des définitions de la vulnérabilité que nous avons rencontrées dans la littérature ne fait d'hypothèse sur cette relation, ce qui limite l'intérêt pratique de la vulnérabilité: en effet, celle-ci ne peut servir à déterminer la pression de pollution admissible; on ne pourra l'utiliser par exemple que pour déterminer une sensibilité *relative* de différentes zones géographiques à la contamination.

I-6.2. Méthodes de caractérisation de la vulnérabilité

On distingue en général trois manières de définir la vulnérabilité (Civita, 1993) :

- le potentiel de contamination de la ressource en eau, lié aux propriétés de mobilité et de persistance du contaminant;
- la vulnérabilité intrinsèque, qui est déterminée uniquement par les propriétés du milieu vulnérable, indépendamment des propriétés du contaminant;
- la vulnérabilité spécifique, qui dépend à la fois des propriétés du milieu et du contaminant. Ce type de vulnérabilité est alors évalué pour une classe de produits bien définie, dont les propriétés physico-chimiques sont semblables (Civita, 1993, Hollis & Brown, 1993).

Le degré de vulnérabilité de la ressource en eau peut être représenté de différentes façons (Civita, 1993):

- sous la forme d'appréciations qualitatives (exemple: "peu vulnérable", "vulnérable", "très vulnérable"). On citera l'indice GOD (Cf. § I-6.2.2);
- sous une forme quantitative n'ayant pas de signification physique directe (exemple: les valeurs numériques données par l'indice DRASTIC, . § I-6.2.2);
- sous une forme quantitative, dérivée d'une modélisation, même simplifiée, du devenir des contaminants (exemple: indices RF, § I-6.2.1., et AF, § I-6.2.3).

Le tableau I-2 à la fin de ce chapitre présente une vision d'ensemble des diverses méthodes d'estimation de la vulnérabilité de la ressource en eau.

Il faut noter que, dans le cas des méthodes décrites ci-dessous, la notion de ressource en eau est restreinte à l'aquifère.

I-6.2.1. Potentiel de contamination

Albinet et Margat (1970) définissent la vulnérabilité de la ressource en eau comme:

"La possibilité d'infiltration et de diffusion des contaminants dans les eaux souterraines sous des conditions naturelles."

Cette vulnérabilité dépend des propriétés de mobilité et de persistance des produits, il est possible de définir des indices de vulnérabilité de la ressource en eau se fondant uniquement sur ces propriétés.

- * On citera l'indice RF (Retardation Factor), proposé par Rao et Jessup (1983), qui tient compte de la mobilité du produit uniquement. Cet indice fait appel à l'hypothèse d'une adsorption instantanée linéaire du produit phytosanitaire sur la matrice poreuse et

suppose que la teneur en eau dans le sol est la plupart du temps voisine de la teneur volumique en eau correspondant à la capacité au champ θ_{fc} .

$$RF = 1 + \frac{\rho_d f_{oc} K_{oc} + (\eta - \theta_{fc}) K_H}{\theta_{fc}} \quad (I.41)$$

- * L'indice GUS (Groundwater Ubiquity Score) tient compte des phénomènes d'adsorption et de dégradation (Gustavson, 1989):

$$GUS = (4 - \log K_{oc}) \log \tau \quad (I.42)$$

où τ (s) est la demi-vie du produit.

- * Laskowski et al. (1982) proposent l'indice LEACH, qui tient compte de la volatilité du produit pour estimer son transfert dans la zone non saturée. Il est défini par:

$$LEACH = \frac{P_v \tau}{C_s K_{oc}} \quad (I.43)$$

Où P_v (Pa) est la pression de vapeur saturante du produit et C_s (kg.m^{-3}) sa solubilité dans l'eau.

I-6.2.2. Vulnérabilité intrinsèque

Plusieurs définitions de la vulnérabilité intrinsèque des aquifères se rencontrent dans la littérature:

- L'ensemble des facteurs en surface et dans le milieu souterrain qui influencent le mouvement d'un contaminant vers l'aquifère (Vrana, 1981) ;
- La sensibilité de la qualité des eaux de l'aquifère par rapport aux activités d'origine humaine susceptibles d'engendrer la contamination de l'aquifère (Bachmat & Collins, 1987) ;
- L'ensemble des caractéristiques intrinsèques qui déterminent la sensibilité des différentes régions d'un aquifère par rapport à des apports extérieurs de contaminants (Foster, 1987).
- La susceptibilité de l'aquifère, dans ses différentes parties constitutives et dans diverses situations hydrodynamiques, d'assimiler et de diffuser des contaminants dont l'impact sur la qualité de l'eau est fonction du temps et de l'espace (Civita, 1987) ;
- * GOD, acronyme de Groundwater occurrence, Overall aquifer class, Distance to aquifer (Foster, 1987), qui caractérise la vulnérabilité de la ressource en eau en tenant compte des facteurs suivants:
 - type de l'aquifère (nappe libre, captive),
 - degré de consolidation ou de fissuration du sol

- distance surface du sol-nappe.

Le site est caractérisé en affectant à chacun de ces facteurs une valeur numérique allant de 0 à 1, en obéissant à une échelle définie à l'avance. Le produit de ces trois paramètres permet de situer la vulnérabilité de l'aquifère dans l'échelle suivante: "négligeable", "faible", "moyenne", "grande", "extrême".

- * L'indice DRASTIC, acronyme de Depth to water, net Recharge, Aquifer media, Soil media, Topography, Impact of the vadoze zone media, hydraulic Conductivity of the aquifer (Aller et al., 1985) prend en compte les paramètres suivants:

- distance surface du sol-nappe (initiale D),
- recharge de l'aquifère (initiale R),
- matériau formant l'aquifère (initiale A),
- composition du sol (initiale S),
- pente du terrain (initiale T),
- impact de la composition du sol sur le transfert du produit (initiale I),
- conductivité hydraulique de l'aquifère (initiale C).

Le site est également caractérisé en affectant une valeur numérique entre 0 et 10 à chacun de ces sept paramètres. Chacun de ces paramètres est caractérisé par un poids et la vulnérabilité est donnée sous la forme d'une valeur numérique, par la formule:

$$V = \sum_{i=1}^7 a_i N_i \quad (I.44)$$

où a_i représente le poids du i -ème paramètre et N_i la valeur numérique qui lui est affectée. Les poids respectifs des initiales DRASTIC sont habituellement de 5, 4, 3, 2, 5 et 3 (Civita, 1993).

- * Marcolongo et Pretto (1987) proposent une évaluation de la vulnérabilité intrinsèque d'un site suivant une modélisation simplifiée des processus hydrologiques. La vulnérabilité de l'aquifère est caractérisée par une grandeur notée V (s^{-1}), inversement proportionnelle à la durée de transfert de l'eau de la surface du sol à la nappe. Cette durée de transfert est estimée en faisant l'hypothèse d'un écoulement piston dans la zone non saturée:

$$V = \frac{K I_F}{\theta L} \quad (I.45)$$

Où K (m.s^{-1}) représente la valeur moyenne de la perméabilité dans la zone non saturée, L (m) la distance surface-nappe, I_F (adimensionnel) le facteur d'infiltration ($0 < I_F < 1$) et θ la teneur en eau moyenne dans la zone non saturée.

- * Andersen et Gorsk (1987) proposent une méthode de caractérisation de la vulnérabilité d'un aquifère à partir de deux indices, le premier, CR (s⁻¹) traduisant la capacité de renouvellement de l'eau, le second, T (s) caractérisant les durées de transfert dans l'aquifère:

$$CR = \frac{QR}{V_A} \quad (1.46.a)$$

$$T = \frac{V_A}{QR} \quad (1.46.b)$$

où V_A (m³) est le volume de l'aquifère et QR (m³.s⁻¹) le débit de recharge.

I-6.2.3. Vulnérabilité spécifique

Les définitions que l'on pourrait donner de la vulnérabilité spécifique sont identiques à celles données dans le paragraphe précédent, exception faite que les caractéristiques des produits doivent être intégrées dans la détermination de la vulnérabilité.

La majorité des méthodes de caractérisation de la vulnérabilité spécifique font appel à des modélisations simplifiées de l'écoulement et du transport dans la zone non saturée. La vulnérabilité de la ressource en eau est présentée sous la forme de valeurs numériques, qui traduisent le plus souvent la proportion avec laquelle le contaminant est dégradé durant son trajet de la surface du sol à la nappe. Ce facteur de dégradation est en général estimé en faisant l'hypothèse d'un régime d'écoulement permanent, d'une adsorption et d'une cinétique de dégradation linéaires dans la zone non saturée.

- * l'indice AF (Attenuation Factor; Rao et al., 1985) est calculé selon la formule suivante:

$$AF = e^{- (L RF \theta_{fc} / Q \tau) \ln 2} \quad (1.47)$$

RF est le facteur retard défini par (I.41), les autres paramètres ayant été précédemment définis.

- * l'indice LPI (Leaching Potential Index) fait appel aux mêmes hypothèses (Meeks et Dean, 1990):

$$LPI = 1000 \frac{Q \tau}{RF L \ln 2} \quad (1.48)$$

- * Dans le cas de produits très volatils, la principale cause de contamination de la nappe peut être la diffusion de la fraction volatilisée du produit dans la phase aérée du sol. Jury et al (1983) proposent une formule simplifiée pour le calcul de la durée Td (s) de transfert par diffusion:

$$Td = \frac{L^2 \eta^2 \theta_{fc} RF}{Dg (\eta - \theta) \frac{10^3}{K_H}} \quad (1.49)$$

où Dg (m².s⁻¹) est la diffusivité du produit en phase gazeuse.

- * La vulnérabilité de la ressource en eau peut être également estimée en faisant intervenir des modélisations plus complexes. Lubello & Preti (1993) présentent une méthodologie, faisant appel à une modélisation mécaniste du transport des produits phytosanitaires dans la zone non saturée d'un bassin versant italien. La définition de la vulnérabilité employée par ces auteurs était cependant plus orientée vers des objectifs agronomiques que vers la protection de la ressource en eau.

I-6.2.4. Récapitulatif

Le tableau I-2 ci-dessous résume les caractéristiques des différentes méthodes d'évaluation de la vulnérabilité mentionnées plus haut.

	Potentiel de contamination	Vulnérabilité intrinsèque	Vulnérabilité spécifique
Appréciation qualitative	-	GOD (Foster)	-
Valeur numérique ne résultant pas d'une modélisation	-	DRASTIC (Aller et al.)	-
Valeur numérique résultant d'une modélisation	GUS (Gustavson) LEACH (Laskowski et al.) RF (Rao et Jessup)	V (Marcolongo et Preto) CR, T (Andersen et Gorsk)	AF (Rao et al.) LPI (Meeks et Dean) Td (Jury et al.)

Tableau I-2 : synoptique des différentes méthodes d'évaluation de la vulnérabilité

Parmi les trois types de vulnérabilité détaillés ci-dessus, la notion de vulnérabilité spécifique de la ressource en eau est celle qui prend en compte le plus grand nombre de phénomènes. Du point de vue pratique, elle est également préférable à la notion de vulnérabilité intrinsèque et de potentiel de contamination, car elle *intègre à la fois les caractéristiques du produit et du site*. On relève cependant trois obstacles majeurs à l'application de la notion de vulnérabilité de la ressource en eau pour des objectifs de définition des pratiques agricoles:

- aucune des méthodes exposées dans les paragraphes précédents ne tient compte des exigences de qualité de la ressource en eau. Néanmoins, un captage dont l'eau n'est pas traitée après pompage est beaucoup plus vulnérable à la contamination qu'un captage dont l'eau subit un traitement de potabilisation;
- toutes les méthodes présentées font l'hypothèse que la ressource en eau concerne l'aquifère tout entier et ne tiennent compte que du transfert des produits dans la zone

non saturée. En réalité, l'intensité de la contamination d'un captage par des produits épandus en surface dépend également des écoulements dans l'aquifère;

de l'avis même de leurs auteurs, les indices de vulnérabilité présentés ci-dessus ne peuvent être utilisés que pour comparer entre eux des produits ou des sites: ils ne peuvent être employés pour prédire les quantités de produits qui parviendront à l'aquifère. On ne peut donc les utiliser pour déterminer des taux d'épandages admissibles en produit.

I-7. CONCLUSIONS

Les difficultés que l'on rencontre dans la modélisation du devenir des produits phytosanitaires en milieu souterrain sont dues aux raisons suivantes:

- La méconnaissance des lois influençant le devenir des produits ; on citera en exemple les incertitudes entachant la détermination du prélèvement racinaire.
- La méconnaissance des paramètres attachés à ces lois. La mobilité et la persistance des produits dépendent en effet de nombreux facteurs qu'il est difficile de connaître à l'échelle du bassin versant, comme le pH ou la température des sols.
- La méconnaissance des conditions initiales (étendue et intensité de la pollution dans les aquifères et la zone non saturée) et des forçages (historique des apports en produits par les exploitants agricoles) qui conditionnent le devenir des produits.

La modélisation ne peut alors plus servir à indiquer des valeurs numériques exactes de concentrations en produits, mais elle peut être utilisée pour dégager des tendances, ou pour une prévention de la contamination. C'est cette approche que recouvre la notion de vulnérabilité de la ressource en eau, qui s'affranchit de la connaissance des apports et des conditions initiales dans le système étudié. Cependant, la vulnérabilité ne donne pas d'indications concrètes sur la pression de pollution admissible à la surface du sol, qui est pourtant le paramètre sur lequel peuvent jouer les exploitants agricoles et les décideurs. En outre, toutes les méthodes d'estimation de la vulnérabilité passées en revue au paragraphe précédent négligent la composante horizontale du transfert des produits phytosanitaires dans les aquifères. Cette composante est pourtant à la base de la notion de périmètre de protection des captages et elle ne peut pas être négligée dans les modélisations.

Aussi avons-nous été conduit à envisager une approche alternative à l'estimation de la vulnérabilité, qui est exposée dans le chapitre III. La notion de risque de contamination de la ressource en eau peut également être prise en compte par la méthode qui sera décrite dans le chapitre IV.

II - MODELISATION HYDROLOGIQUE DE BASSINS VERSANTS AVEC LE LOGICIEL MIKE SHE

Résumé

Ce chapitre présente la modélisation hydrodynamique de deux bassins versants à l'aide du logiciel MIKE SHE. Le modèle a été réglé sur la base d'observations très peu nombreuses. On distingue deux types de critères pour le réglage: les critères de bilan et les critères dynamiques. La pertinence des critères de réglage et de validation peut varier en fonction de la morphologie et de la taille du bassin. Les critères de validation dont nous disposons ne sont pas les plus pertinents et nous sommes amenés à étendre la notion de validation couramment acceptée dans la littérature. Le modèle actuel souffre de plusieurs limitations, dont l'impossibilité de prendre en compte la variabilité saisonnière des caractéristiques des sols.

II-1. OBJECTIF DE LA MODELISATION - PRESENTATION DU SITE

Nous rappelons que le but de nos travaux est la mise au point d'une méthodologie d'utilisation des outils de modélisation du devenir des produits phytosanitaires, afin de protéger les captages en aquifère de la contamination par les produits phytosanitaires. La modélisation du devenir des produits phytosanitaires demande la connaissance de l'hydrodynamique du site étudié. L'application de cette méthodologie aux sites du Grand Morin et du Vannetin a donc consisté, dans un premier temps, en une modélisation de leur hydrodynamique.

II-1.1. Choix du site

Le site-test choisi pour l'application de la méthodologie est le bassin versant du Vannetin, qui est un sous-bassin du bassin du Grand Morin, situé en région parisienne (Cf. § II-3.1.) . La modélisation hydrologique du bassin versant du Vannetin était donc nécessaire; cependant, une telle modélisation demande la connaissance de nombreux paramètres hydrauliques, ainsi que des conditions aux limites du modèle du bassin (charge ou gradient de charge dans l'aquifère). Il faut également disposer de résultats de mesures expérimentales sur le bassin, afin de pouvoir régler le modèle. Ces données n'étant pas disponibles sur le bassin du Vannetin, on a eu recours à l'approche dite "des modèles emboîtés":

- on construit dans un premier temps le modèle hydrologique d'un bassin versant plus grand (dit "modèle global"), qui contient le bassin d'intérêt, et sur lequel on dispose des données expérimentales qui font défaut dans le bassin plus petit. Le réglage des paramètres hydrologiques est effectué sur ce modèle;

- on effectue ensuite la simulation hydrodynamique du bassin versant d'intérêt ("modèle de détail"), en reprenant les valeurs des paramètres et des conditions aux limites obtenues par le réglage du modèle global. La définition des conditions aux limites pour le modèle de détail demande en général une interpolation spatiale des résultats de calcul du modèle global.

Cette approche présente deux limitations:

- l'interpolation des résultats de calcul du modèle global amène une perte de précision dans la définition des conditions aux limites du modèle de détail;
- Cette perte de précision implique une autre perte de précision dans les résultats du calcul, au voisinage de la limite du modèle de détail.

II-1.2. Choix de l'outil de modélisation

L'outil de modélisation hydrologique devait répondre aux exigences suivantes:

- la possibilité de modéliser l'intégralité du cycle hydrologique continental. En effet, l'échelle d'étude implique la représentation de nombreux phénomènes en interaction; on citera par exemple les transferts dans le continuum sol-plante-atmosphère, ou les échanges nappe-rivière;
- la capacité à tenir compte des effets de la spatialisation des paramètres et des conditions aux limites;
- la possibilité d'"emboîter" les modèles, approche décrite au paragraphe précédent;
- la capacité à représenter la structure aquifère complexe du bassin du Grand Morin.

Le logiciel MIKE SHE (Abbott et al., 1986.a, 1986.b), qui modélise l'intégralité du cycle hydrologique continental, permet de rendre compte de tous ces phénomènes. De plus, il a été très peu appliqué pour l'instant à la modélisation de sites réels en France: nos travaux représentaient donc l'opportunité d'une première validation. En outre, la modélisation de deux sites de tailles très différentes devait permettre de mieux cerner les critères pertinents de réglage du modèle MIKE SHE et un éventuel effet de taille sur la pertinence de ces critères.

II-2. LE SYSTEME DE MODELISATION MIKE SHE

II-2.1. Généralités sur MIKE SHE

Le logiciel MIKE SHE est le résultat d'une industrialisation du SHE (Système Hydrologique Européen), à l'origine développé par une collaboration tripartite entre le l'Institute of Hydrology (Royaume-Uni), le Danish Hydraulic Institute - DHI (Danemark) et la société SOGREAH (France). Il s'agit d'un modèle du type mécaniste déterministe. Son objet est de modéliser la partie continentale du cycle hydrologique sur la base d'une description physique des processus d'échange entre les différentes composantes de l'hydrosphère (Cf. figure II-1 ci-dessous):

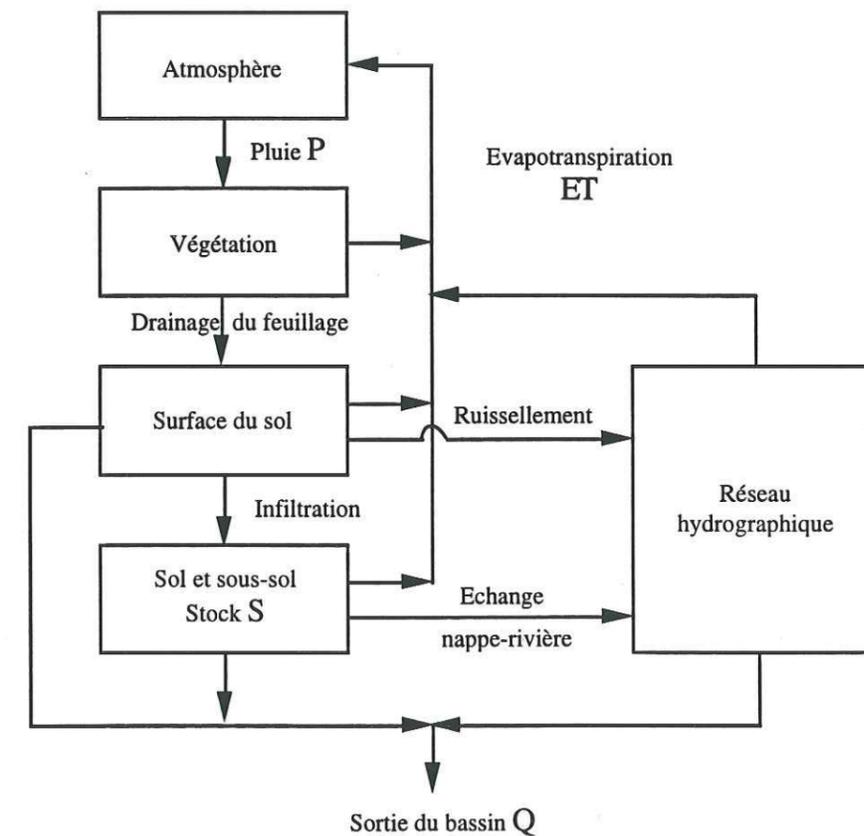


Figure II-1 : principaux compartiments naturels pris en compte dans la modélisation MIKE SHE

Les équations de conservation de masse et d'énergie relatives à chaque partie du cycle de l'eau sont résolues numériquement par des modules spécifiques:

- Un module de calcul de l'évapotranspiration et de l'interception des précipitations par la couverture végétale ;

- Un module de calcul des écoulements de surface (ruissellement et écoulements en rivière) ;
- Un module de calcul des écoulements dans la zone non saturée ;
- Un module d'écoulement en aquifère.
- Un module de calcul de fonte des neiges ;

Suivant le type d'application que l'on désire mettre en oeuvre, il est possible de n'utiliser que quelques modules sur les cinq proposés. En particulier, le module de fonte nivale n'a pas été mis en oeuvre dans cette étude.

Dans les paragraphes suivants, on présente rapidement les quatre modules utilisés ici.

II-2.2. Module de calcul de l'évapotranspiration

Ce module détermine, à partir des données météorologiques et des caractéristiques de la couverture végétale, la pluie nette résultant des processus physiques suivants :

- interception de la pluie par le feuillage;
- évaporation de l'eau stockée à la surface des feuilles;
- prélèvement d'eau par le système racinaire;
- évaporation de l'eau dans les couches supérieures du sol, et à la surface du sol lors du ruissellement.

L'évapotranspiration est modélisée par le modèle de Kristensen et Jensen (1975). Ce modèle, de type conceptuel, décrit l'évapotranspiration sur la base de quatre principaux paramètres :

C_{int} , capacité d'interception du feuillage (en mm). Ce paramètre traduit la capacité qu'a le feuillage d'accumuler une certaine quantité d'eau pendant un certain pas de temps de calcul. Lorsque la pluie accumulée dépasse cette capacité, l'eau de pluie ruisselle entièrement du feuillage vers le sol;

C_1 , paramètre traduisant l'influence de la densité du feuillage sur la faculté de la plante à prélever l'eau dans le sol et à l'évacuer dans l'atmosphère (transpiration);

C_2 , paramètre traduisant la facilité de transfert de l'eau dans le sol. Ce paramètre agit sur les phénomènes de prélèvement racinaire, d'évaporation dans le sol et à la surface de la nappe;

C_3 caractérise l'influence des propriétés hydrodynamiques du sol sur la transpiration;

L'évapotranspiration E_{at} ($m.s^{-1}$) est ainsi donnée par la formule :

$$E_{at} = f_1(LAI) * f_2(\theta) * RDF * E_p \quad (II.1)$$

où LAI (adimensionnel) est l'indice foliaire, RDF (adimensionnel) la densité racinaire et E_p ($m.s^{-1}$) l'évapotranspiration potentielle. Les fonctions f_1 et f_2 , déterminées de manière empirique, sont données par:

$$f_1(LAI) = \min(C1.LAI, 1-C2) \quad (II.2)$$

$$f_2(\theta) = 1 - \left(\frac{\theta_{fc} - \theta}{\theta_{fc} - \theta_w} \right)^{C3} \quad (II.3)$$

θ_w étant la teneur volumique en eau au point de flétrissement.

II-2.3. Module d'écoulements dans la zone non saturée

Ce module gère l'évolution du stock d'eau dans la zone non saturée du sol, en tenant compte des phénomènes suivants :

- Infiltration des précipitations ou d'une lame d'eau éventuellement présente à la surface du sol;
- Evaporation de l'eau à partir de la couche superficielle du sol (limite supérieure) ;
- Prélèvement racinaire par les plantes ;
- Mouvements de l'eau dus aux effets capillaires et gravitaires ;
- Echanges, à la limite inférieure, avec une nappe phréatique éventuelle.

Ce module met en oeuvre la résolution de l'équation de Richards (Cf. § I-2.1.) suivant un schéma numérique aux différences finies dans un cadre unidirectionnel vertical, la gravité exerçant dans la zone non saturée une influence suffisante par rapport aux gradients d'humidité horizontaux pour que les composantes horizontales du mouvement puissent être considérées comme négligeables.

L'équation correspondante est:

$$C_c(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right) \right) + Q_h \quad (II.4)$$

Où z est la cote (m), orientée positivement vers le haut.

A l'interface entre deux couches de sol de caractéristiques différentes, la résolution de l'équation de Richards est assurée en imposant une condition de continuité sur le potentiel

matriciel ψ . Le lecteur intéressé par la discrétisation de l'équation de Richards pourra se reporter à l'annexe AI pour plus de détails.

L'évolution de la conductivité hydraulique K en fonction de la teneur en eau θ du sol est donnée par la formule d'Averjanov (1950) :

$$K(\theta) = K_s \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^b \quad (II.5)$$

Avec θ_r (m^3/m^3) teneur volumique en eau résiduelle, θ_s (m^3/m^3) teneur volumique en eau à saturation et b exposant d'Averjanov.

La relation entre le potentiel matriciel ψ et la teneur volumique en eau θ du sol est déterminée à l'aide d'une interpolation de type spline cubique à partir de couples de points (ψ, θ) donnés par l'utilisateur. La relation (ψ, θ) est univoque, il n'y a donc pas prise en compte des phénomènes hystérétiques mentionnés au chapitre I (Cf. § I-2.1.)

II-2.4. Module d'écoulements dans la zone saturée

La modélisation de la zone saturée prend en compte les phénomènes suivants :

- Echanges avec la zone non-saturée ;
- Echanges avec le réseau hydrographique (interactions nappe-rivière) ;
- Echanges avec les écoulements de surface ;
- Evolution de la nappe phréatique due aux gradients de charge piézométrique.

Le modèle de nappe est multicouches, dans un cadre bidirectionnel horizontal. L'échange entre deux couches voisines est régi par la différence de charge entre ces couches. Les écoulements sont modélisés par l'équation de Boussinesq :

$$S_y \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K h_c \frac{\partial H}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K h_c \frac{\partial H}{\partial y} \right) + Q \quad (II.6)$$

Où S_y (m^3/m^3) est le coefficient d'emmagasinement, h_c (m) l'épaisseur de la couche et Q ($m.s^{-1}$) la recharge.

Le coefficient d'emmagasinement exprime la proportion de la variation de la hauteur d'eau stockée dans l'aquifère par rapport à la variation de la charge.

Pour une couche libre en équilibre hydrostatique, ce coefficient d'emmagasinement va être égal à la différence entre la teneur volumique en eau à la surface de la nappe (teneur volumique en eau à saturation) et la teneur volumique en eau à la surface du sol (Cf. figure II-2): cette valeur, qui varie en général entre 1% et 20%, dépend de la position du toit de la nappe par rapport à la surface du sol.

Lorsque la couche est captive, la variation de volume stocké dans la couche est due uniquement à la compressibilité de l'eau et du sol: les valeurs de coefficient d'emmagasinement captif sont plus faibles que pour un coefficient d'emmagasinement libre, en général de l'ordre de 0,1 %.

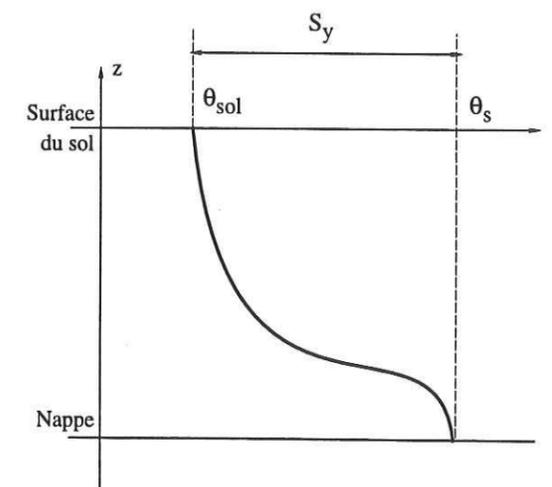


Figure II-2: Signification physique du coefficient d'emmagasinement

La grandeur $K.h_c$ ($m^2.s^{-1}$) est appelée transmissivité de la couche. L'interpolation de la transmissivité entre deux mailles voisines est effectuée suivant une moyenne harmonique à partir des transmissivités de chacune des mailles. Cette méthode de calcul offre l'avantage de prendre en compte de fortes discontinuités de propriétés physiques de l'aquifère sur un nombre restreint de points de calcul (Cf. annexe AI).

II-2.5. Module d'écoulements de surface

Le module d'écoulements de surface modélise les phénomènes suivants :

- Ecoulements dans le réseau hydrographique;
- Ruissellement de la lame d'eau accumulée sur le sol;
- Interactions entre le réseau hydrographique et le ruissellement (possibilités de débordement de la rivière dans la plaine ou de déversement de l'écoulement en plaine dans la rivière);
- Interactions avec la nappe phréatique.

Les équations de l'écoulement dans le réseau hydrographique (du type Barré de St Venant unidirectionnel) sont résolues par un schéma aux différences finies implicite ; les équations du ruissellement (du type onde diffusive) sont résolues avec une méthode aux différences finies implicite. On présente ci-dessous ces équations pour la configuration bidirectionnelle:

$$\frac{\partial h_r}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u.h_r) + \frac{\partial}{\partial y}(v.h_r) = S_f \quad (II.7.a)$$

$$\frac{\partial h_r}{\partial x} = I_x - F_x \quad (II.7.b)$$

$$\frac{\partial h_r}{\partial y} = I_y - F_y \quad (II.7.c)$$

où h_r (m) est l'épaisseur de la lame d'eau, F_x et F_y les pentes ($m.m^{-1}$) de la ligne d'énergie dans les directions x et y respectivement, I_x et I_y ($m.m^{-1}$) les pentes du substratum dans les directions respectives x et y , S_f ($m.s^{-1}$) le terme de frottement, u et v ($m.s^{-1}$) les vitesses suivant x et y respectivement.

Le réseau hydrographique est modélisé par un modèle unidimensionnel de réseaux maillés. Les tronçons fluviaux sont situés à l'interface entre les mailles du modèle bidirectionnel d'écoulements de surface. Les équations sont, au niveau unidimensionnel, identiques à celles du modèle de ruissellement.

II-2.6. Données nécessaires à la modélisation

En raison de la quantité de phénomènes modélisés, les données nécessaires à leur simulation sont très nombreuses (Jain et al., 1992; Lohani et al., 1993; Refsgaard et al., 1992.a):

- Données relatives aux écoulements de surface : rugosité du terrain, topographie, cartes des types de sols et chroniques des pluies réparties spatialement.
- Réseau fluvial : définition du profil en travers et valeur de la rugosité pour chaque tronçon du réseau.
- Données relatives à la zone non saturée : relations potentiel matriciel-teneur volumique en eau-conductivité hydraulique pour chaque type de sol.
- Paramètres du modèle d'évapotranspiration pour chaque classe de couvert végétal.
- Données relatives à la zone saturée : conductivité hydraulique dans l'aquifère, cotes de substratum pour chaque entité hydraulique prise en compte dans l'étude, coefficient d'emmagasinement libre ou captif.

II-3. MODELISATION D'UN BASSIN VERSANT DE GRANDE TAILLE, LE BASSIN DU GRAND MORIN

II-3.1. Description du site

II-3.1.1. Situation géographique

Le Grand Morin est l'affluent en rive gauche de la Marne à Meaux. La superficie du bassin versant est planimétrée à 1235 km^2 (SOGREAH, 1961). La rivière Grand Morin compte un affluent principal en rive gauche, l'Aubetin. Ces deux rivières coulent dans des vallées assez profondes creusées dans les plateaux de la Brie. La figure II-3 illustre la géographie du bassin.

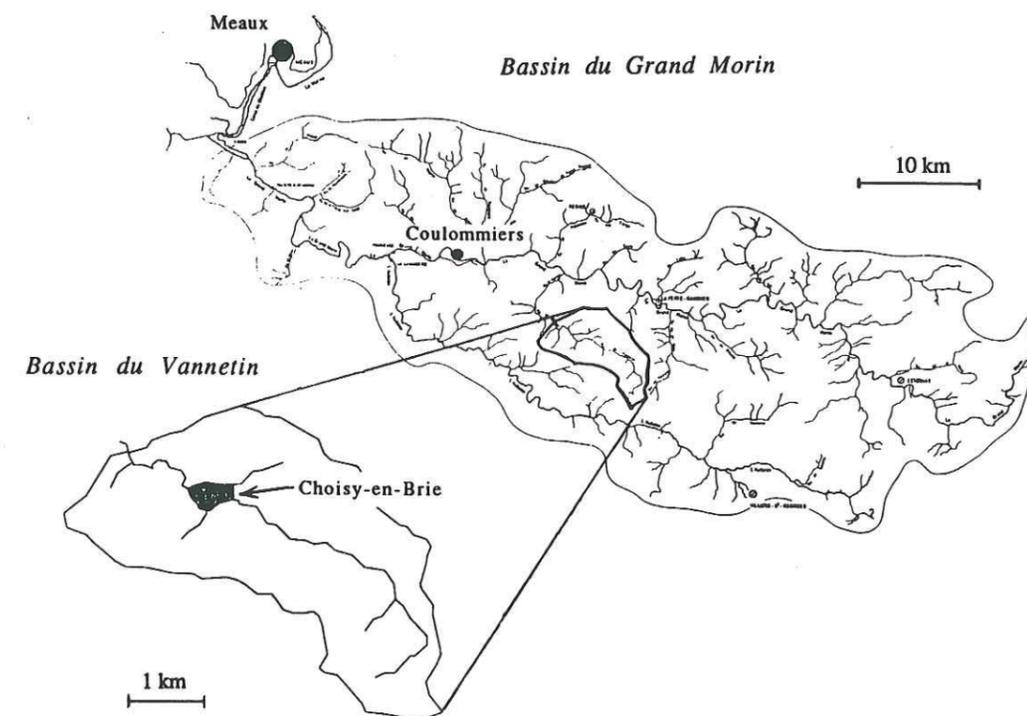


Figure II-3: Géographie du bassin du Grand Morin

Au niveau de la vallée du Grand Morin, la présence d'un lit majeur assez large (entre 200 et 500 m) et de berges assez basses (hauteur de 2 m environ), favorise des débordements fréquents de la rivière. Cette morphologie explique sans doute que la rivière soit endiguée dans toutes les agglomérations importantes (Jouy-sur-Morin, Coulommiers). A l'aval de Jouy-

sur-Morin, la largeur du Grand Morin est de l'ordre de 6 à 7 mètres, pour atteindre 10 à 12 mètres au niveau de Pommeuse. Le lit majeur de l'Aubetin est plus étroit (une centaine de mètres), les berges sont encore plus basses que celles du Grand Morin (1 mètre environ). La largeur de l'Aubetin ne dépasse pas 6 mètres dans sa partie aval. La figure II-4 ci-dessous illustre le profil en long du Grand Morin.

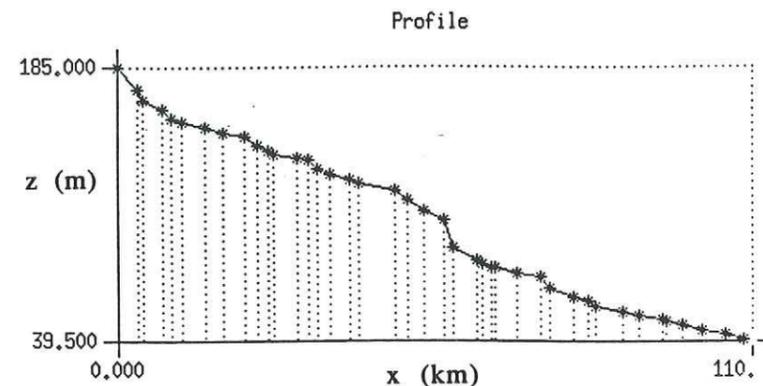


Figure II-4: Profil en long schématique du Grand Morin

La majeure partie des plateaux est occupée par des champs, généralement entourés par des drains qui contribuent à alimenter les ruisseaux affluents du Grand Morin. La proportion de superficie drainée sur le bassin versant est estimée à plus de 50 % (SCEES-INSEE, 1988).

II-3.1.2. Pédologie, occupation des sols

Une étude pédologique (SOGREAH 1961) a permis de distinguer trois principaux types de sol :

- Les limons anciens, que l'on trouve principalement sur les plateaux. Ils représentent une fraction peu importante de la superficie du bassin. Le rapport d'étude SOGREAH mentionne notamment la faible perméabilité de cette formation, ainsi que la présence d'un horizon argileux à faible profondeur (1 m environ). Pratiquement saturés en hiver et au printemps, ils sont peu intéressants du point de vue agricole ;
- Les limons moyens ; formant un horizon d'une épaisseur de 3 à 4 m, ils représentent la catégorie de sol la plus étendue en superficie sur le bassin. Ils sont présents en particulier sur les plateaux. Très peu perméables dans leur partie inférieure, ils présentent un horizon saturé à une profondeur de l'ordre du mètre en saison humide (hiver, printemps).

- Les limons colluviaux, que l'on trouve principalement dans les vallées et les thalwegs des affluents. Beaucoup plus perméables que les deux types de sols précédents, ils sont également caractérisés par une profondeur plus importante.

Le tableau II-1 ci-dessous donne la composition granulométrique de ces sols (SOGREAH, 1961).

Sol	% sable	% argiles	% limons
limons anciens	4	24	72
limons moyens	4	14	82
Limons colluviaux	15	17	68

Tableau II-1: granulométrie des trois principaux types de sols

On distingue trois types principaux d'occupation des sols sur ce bassin versant :

- Les zones agricoles, qui occupent la plupart du bassin ;
- les zones boisées, que l'on rencontre plutôt dans la partie est du bassin ;
- les zones urbaines, généralement proches des rivières.

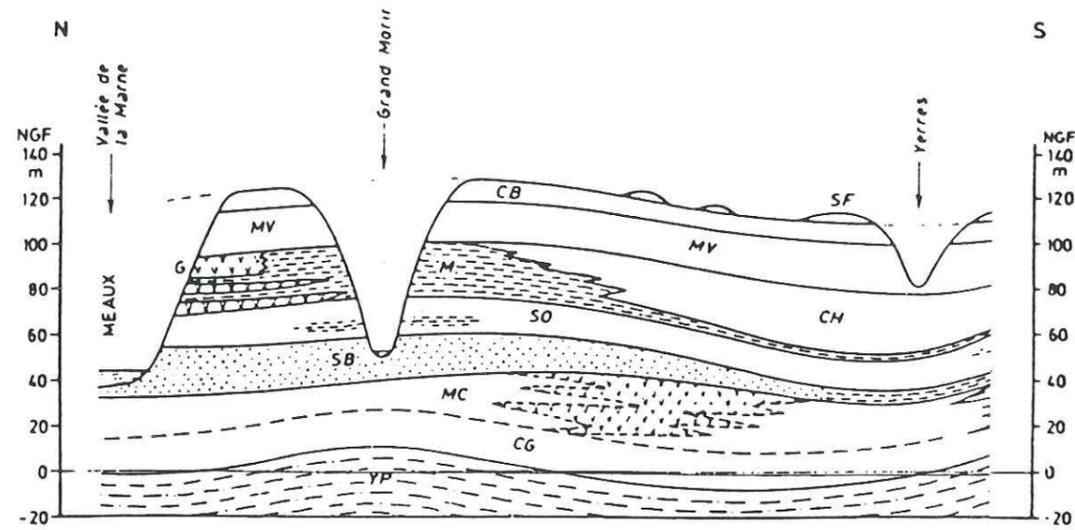
II-3.1.3. Géologie du bassin

Le sous-sol du bassin versant est constitué principalement d'une superposition de couches marneuses et calcaires (Cf. fig. II-5; d'après Mégnien, 1979). Deux aquifères principaux déterminent le comportement hydrologique du bassin versant: l'aquifère des calcaires de brie, limité aux plateaux, et l'aquifère des calcaires de Champigny, situé plus profondément. Les deux aquifères sont séparés par une couche de marnes supragypseuses, dont l'épaisseur varie entre 10 et 15 m (Mégnien, 1979).

L'aquifère des calcaires de Brie a une superficie de 700 km² environ (BURGEAP 1993). Le substratum de cet aquifère affleure sur les versants des vallées, ce qui se traduit par la présence de nombreuses sources et la densité du réseau hydrographique mentionnée au paragraphe 1.2. Sa faible puissance (de 1 à 6 m) ne permet pas d'y capter l'eau potable.

Les captages ont lieu dans la nappe de Champigny, qui s'étend bien au-delà des limites du bassin versant du Grand Morin (Mégnien, 1979). Cet aquifère possède une structure complexe, résultant de la superposition de plusieurs horizons plus ou moins perméables: les calcaires de Champigny, des couches de marnes et les calcaires de Saint-Ouen. De plus, ses propriétés structurales et hydrodynamiques sont très hétérogènes. Au niveau des vallées du Grand Morin et de l'Aubetin, il rencontre une nappe d'une dizaine de mètres d'épaisseur, la nappe des

sables de Beauchamp. S'appuyant sur les relevés piézométriques au niveau de forages en aquifère, Mégnien conclut que les nappes de Beauchamp et de Champigny sont indépendantes au niveau des plateaux.



SF : Sables de Fontainebleau - CB : Calcaires de Brie - MV : Marnes vertes et supragypseuses - G : Gypse ludien - M : Marnes ludiennes - CH : Calcaire de Champigny - SO : Calcaire de Saint-Ouen - SB : Sables de Beauchamp - MC : Marnes et caillasses - CG : Calcaire grossier - LM : Lutétien indifférencié marneux - CL : Calcaire lacustre indifférencié (CH + SO + Lutétien) - YP : Yprésien.

Figure II-5: Structure géologique schématique de la Brie au niveau du bassin du grand Morin

(d'après Mégnien, 1979)

La recharge de la nappe de Champigny possède plusieurs origines: par infiltration directe de la pluie sur les zones où le calcaire affleure, par infiltration à travers les marnes supragypseuses ou par réinfiltration des eaux du réseau fluvial (en particulier l'Aubetin, qui met à nu le calcaire de Champigny sur 40 km environ).

II-3.1.4. Pluviométrie

Des campagnes de mesure faisant appel aux relevés de huit stations pluviométriques de 1950 à 1990 (PIREN-SEINE, 1991) ont permis de constater (figure II-6) que les précipitations sont relativement homogènes en intensité et en fréquence. La pluviométrie moyenne sur le bassin donnée par PIREN-SEINE (1991) est de 650 mm.an^{-1} .

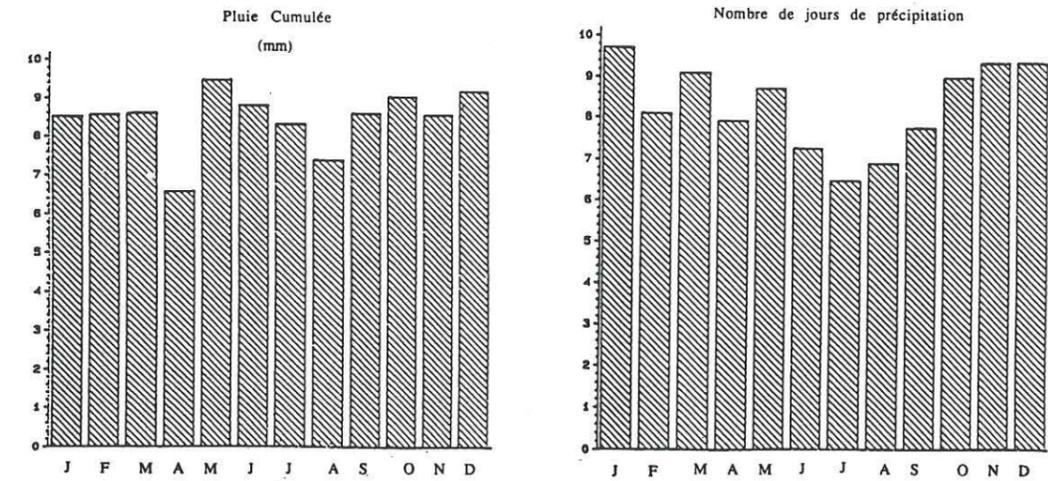


Figure II-6: Répartition en intensité et en fréquence des pluies mensuelles (d'après PIREN-SEINE, 1991)

II-3.2. Données disponibles et choix de modélisation

II-3.2.3. Structure du modèle

Lorsque ce travail a été entrepris, le LHF disposait déjà d'une expérience sur la modélisation du bassin versant du Grand Morin avec le logiciel SHE (LHF, 1992; Pallard, 1992). Cette première tentative de modélisation s'étant révélée peu satisfaisante, plusieurs raisons ont pu être avancées:

- pratiquement aucune donnée n'avait été obtenue sur la structure géologique du bassin;
- le modèle SHE du bassin du Grand Morin avait été discrétisé sur un maillage de deux kilomètres de côté, ce qui rendait la modélisation peu précise;
- le logiciel SHE, alors seul disponible au LHF, ne permettait de modéliser qu'un seul aquifère. La superposition des nappes de Brie et de Champigny ne pouvait pas être représentée dans le premier modèle.

Dans le cadre de la thèse, le modèle MIKE SHE du bassin du Grand Morin a donc été construit selon les principes suivants:

- la résolution a été raffinée pour passer à une taille de maille de 1 km de côté permettant alors de représenter plus finement les interactions du réseau hydrographique avec la nappe;
- trois couches ont été représentées dans le modèle de la zone saturée: l'horizon des calcaires de Brie, les marnes supragypseuses et la couche calcaire de l'aquifère de

Champigny, qui rassemble les calcaires de Champigny et de Saint-Ouen. D'autre part, pour tenir compte du drainage de la nappe de Champigny par la nappe alluviale dans les vallées du Grand Morin et de l'Aubetin, les sables de Beauchamp ont également été pris en compte dans la couche du calcaire de Champigny. Bien que cette modélisation puisse paraître sommaire en regard de la complexité hydrogéologique du site, le manque de données rendait difficilement justifiable une discrétisation plus fine.

II-3.2.2. Géométrie

La topographie était donnée par des cartes IGN à l'échelle 1/25000. Mégnien (1979) a dressé des cartes donnant les altitudes des principaux horizons géologiques sur une zone incluant le bassin du Grand Morin.

II-3.2.3. Données pédologiques

Une carte éditée par l'Agence Financière de Bassin Seine-Normandie (1972) a permis de déterminer la répartition spatiale des types de sol sur le bassin versant avec une précision compatible avec la résolution du modèle. Nous avons distingué dans la modélisation quatre types de sol: les trois types mentionnées dans le paragraphe II-2.1., plus un quatrième représentant les zones urbaines.

La figure II-7 page suivante montre la distribution spatiale de ces sols dans le modèle MIKE SHE.

II-3.2.4. Données agronomiques

L'occupation des sols a été représentée, par quatre types de zone (Cf. figure II-8):

- les zones de culture (champs sur plus de 50 % de la surface de la maille);
- les bosquets (zones boisées occupant entre 0 et 50 % de la surface de la maille);
- les forêts (zones boisées sur la totalité de la maille);
- les zones urbaines.

Nous disposons des cartes IGN sur la totalité du bassin et de cartes du mode d'occupation des sols (Institut d'Aménagement et d'Urbanisme de la Région d'Ile-de-France, 1982) sur le département de la Seine-et-Marne.

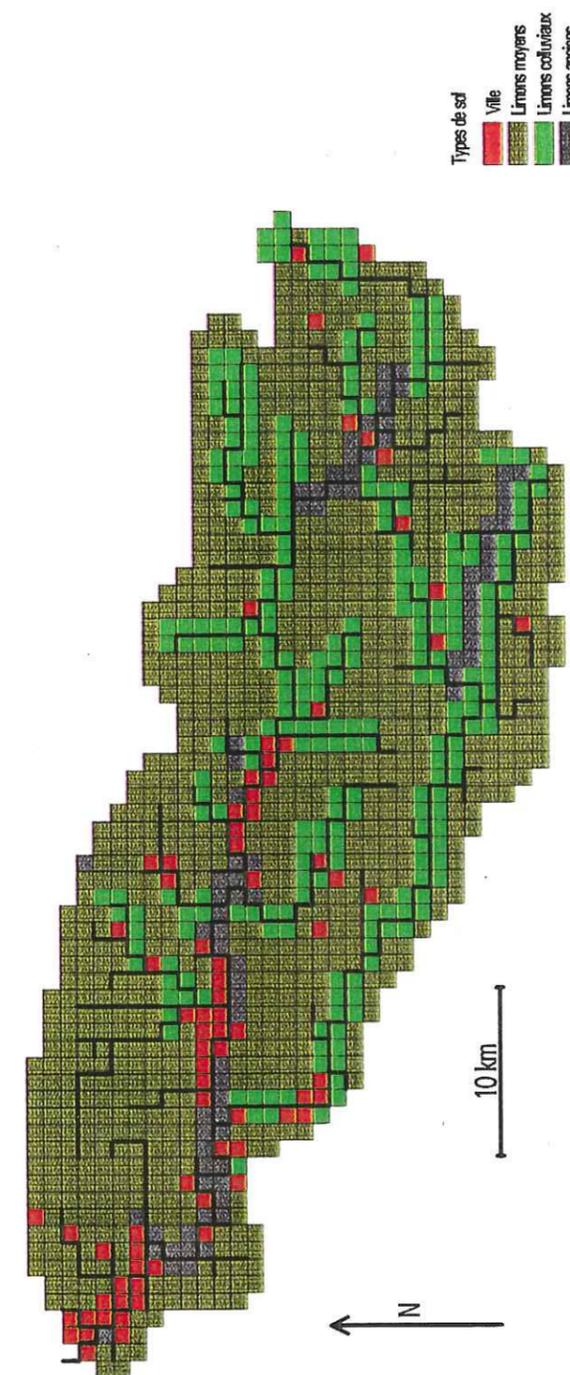


Figure II-7: Distribution spatiale des sols du modèle MIKE SHE

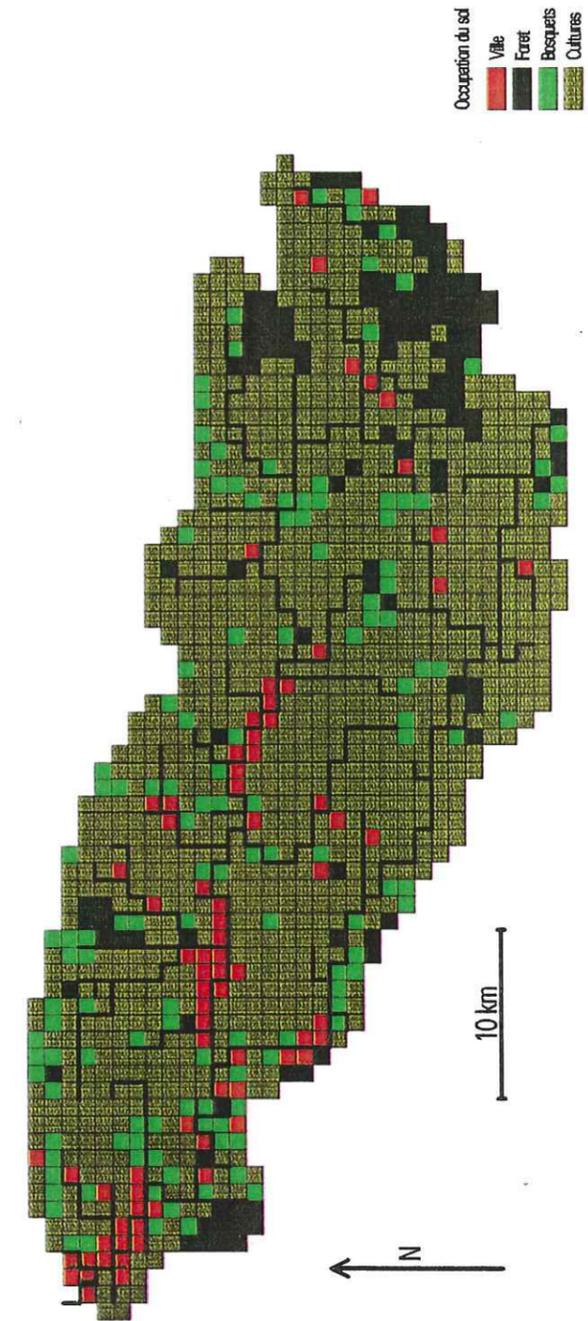


Figure II-8: Répartition spatiale des types de végétation du modèle MIKE SHE

II-3.2.5. Données hydrogéologiques

Diverses études (Mégnién, 1979; BURGEAP, 1993) rapportent des valeurs de la conductivité hydraulique et de la porosité dans les deux aquifères principaux: l'aquifère de Brie possède une conductivité hydraulique de 10^{-5} à 5.10^{-5} m.s⁻¹ et une porosité de 4 %. Dans les calcaires de Champigny, la transmissivité a une valeur moyenne de $2,6.10^{-3}$ m².s⁻¹. L'épaisseur de la nappe étant de l'ordre de 10 m, on en déduit une conductivité de l'ordre de 10^{-4} m.s⁻¹. La porosité moyenne dans la nappe de Champigny est de 5 % (BURGEAP, 1993).

Nous ne disposons d'aucune donnée sur la conductivité des marnes supragypseuses: cette conductivité a été estimée dans un premier temps à 10^{-9} m.s⁻¹.

Nous disposons également d'une carte piézométrique sur la Brie (Cf. figure II-9; Mégnién, 1979).

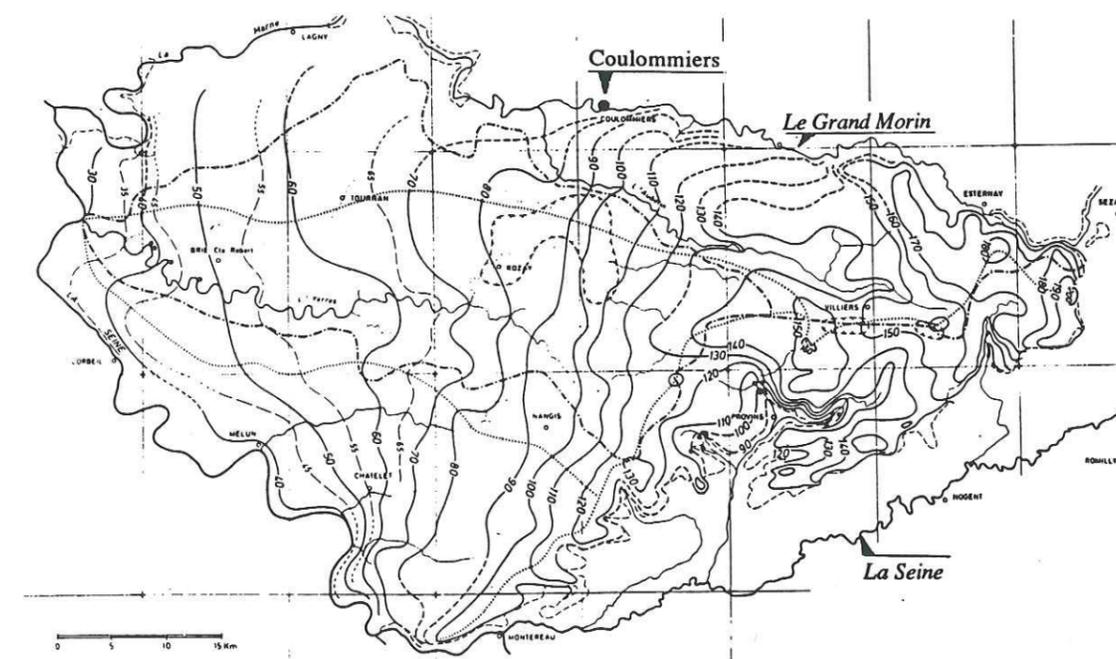


Figure II-9: Carte piézométrique de l'aquifère de Champigny (d'après Mégnién, 1979)

On notera cependant que cette carte ne couvre qu'une partie du bassin du Grand Morin (la zone géographique comprise entre les rivières Grand Morin et Aubetin) et que, dans cette partie, la piézométrie est estimée de manière très incertaine (courbes en pointillés).

II-3.2.6. Données climatiques

Météo France dispose des enregistrements des précipitations journalières en 9 stations du bassin du Grand Morin. Nous nous sommes fondés pour notre modélisation sur les

enregistrements des années 1969 à 1991 incluses. Les précipitations journalières mesurées aux stations ont été attribuées aux différents points du modèle selon la méthode des polygones de Thiessen. A noter toutefois que sur la période 1969-1991, nous avons obtenu, comme valeur moyenne de pluviométrie annuelle sur l'ensemble du bassin, une lame d'eau de 720 mm.

L'évapotranspiration potentielle, estimée par la méthode de Penman, est donnée au pas de temps mensuel par des cartes de L'Agence Financière de Bassin Seine-Normandie (1972).

II-3.2.7. Données hydrométriques

Nous disposons des mesures de débits réalisées, de 1973 à 1992, en deux points du réseau fluvial: la station de Pommeuse (sur le Grand Morin, en amont du confluent avec l'Aubetin) et celle de la Lavanderie (sur l'Aubetin, un kilomètre en amont du confluent).

II-3.3. Réglage du modèle du bassin versant du Grand Morin

II-3.3.1. Méthodologie de réglage d'un modèle MIKE SHE

Le réglage du modèle MIKE SHE a été effectué à partir de critères de différentes natures:

- les bilans hydrologiques (e.g. cumul des débits ruisselés, des précipitations, etc);
- le comportement dynamique (pics de crue, variations piézométriques saisonnières);
- l'application des lois de l'hydraulique.

Les bilans permettent de déterminer un comportement "moyen" du système à modéliser. Ce sont eux que l'on utilise en premier, afin de régler le comportement global du modèle. Les critères dynamiques servent ensuite à affiner des paramètres déjà déterminés approximativement ou inconnus. L'application des lois de l'hydraulique permet de déterminer des paramètres hydrodynamiques (conductivités en aquifère).

Nous avons procédé en deux étapes:

- un bilan hydrologique ayant pour but de déterminer la recharge des aquifères, donc l'évapotranspiration réelle sur le bassin. Les valeurs obtenues étant utilisées pour caler le modèle d'évapotranspiration et pour déterminer des paramètres géométriques;
- l'examen de critères dynamiques: pics de crue, variations saisonnières de la piézométrie des aquifères, mise en eau saisonnière des ruisseaux.

A chaque modification de paramètres influant sur la dynamique du modèle, il faudra procéder à une redéfinition des conditions initiales du calcul: on verra en effet (Cf. § II-5.2.1.) que les conditions initiales dans les aquifères jouent un rôle très important au niveau des résultats de

simulation. En effet, le temps de réaction des nappes (en particulier l'aquifère de Champigny) est d'une cinquantaine d'années environ (au moins dans le modèle). Par conséquent, chaque modification des paramètres hydrologiques (conductivités en aquifère, etc...) doit être accompagnée d'une stabilisation des aquifères, afin de retrouver l'état probable des nappes au début de la simulation. Une fois cet état initial obtenu, une simulation véritablement transitoire peut être amorcée.

III-3.3.2. Réglage de la composante d'évapotranspiration : critère de bilan

On peut considérer que l'eau est stockée dans cinq principaux compartiments naturels (Cf. figure II-1): l'atmosphère, le couvert végétal, la surface du sol, le sol et le sous-sol, et le réseau hydrographique. Ces compartiments échangent des flux et sont caractérisés par des stocks. Ainsi, les précipitations représentent le flux dirigé du compartiment atmosphère vers les quatre autres, alors que l'évapotranspiration correspond à un flux allant en sens inverse. Les compartiments de la végétation, de la surface du sol et du réseau hydrographique représentent un stock négligeable, les deux compartiments les plus importants étant le sol/sous-sol et l'atmosphère.

Pour le bassin modélisé, on procède à un bilan de masse sur les quatre compartiments, en considérant les volumes échangés sur une certaine durée:

$$P_{cum} - Q_{lim} - ET_{cum} - \Delta St = 0 \quad (II.8)$$

Où P_{cum} (mm) est la quantité de pluie tombée durant la période considérée, Q_{lim} (mm) le volume d'eau évacué par les limites, rapportée à la surface du bassin considéré, ET_{cum} (mm) le volume évapotranspiré par unité surface du bassin durant la période considérée et ΔSt (mm) la variation du stock d'eau du sol/sous-sol, divisée par la surface du bassin, durant la période concernée.

* Ce bilan permet d'estimer la valeur de l'évapotranspiration à partir des trois autres grandeurs.

Il a été effectué sur le sous-bassin versant du Grand Morin à Pommeuse, où l'on dispose d'une station de mesure du débit en rivière. On a pour cela émis les hypothèses suivantes:

- on a supposé que le volume évacué par les limites du bassin était pratiquement égal à celui évacué par le réseau fluvial. Ceci se justifie par le fait que, dans les vallées du Grand Morin et de l'Aubetin, la nappe alluviale - qui draine les aquifères du bassin - est très mince (quelques mètres) et ne peut évacuer un débit important. La quantité Q sera calculée en intégrant le débit mesuré à Pommeuse sur la période considérée;

on ne dispose à l'heure actuelle d'aucune donnée sur la variation du stock d'eau des aquifères sur le bassin du Grand Morin. On a donc considéré dans un premier temps que la variation du stock ΔSt pouvait être négligée. Pour minimiser l'erreur relative induite par cette hypothèse, on a effectué le bilan hydrologique sur une période de 4 ans (1987 à 1990), qui donne les valeurs suivantes:

$$P_{cum} = 2880 \text{ mm}$$

$$Q_{lim} = 1100 \text{ mm}$$

$$\Delta St = 0$$

$$ET_{cum} = 1980 \text{ mm}$$

Nota: La valeur de Q_{lim} a été calculée en divisant le volume écoulé dans la rivière par la surface du bassin versant (800 km^2). Q_{lim} est alors le débit spécifique de ce bassin.

* Les caractéristiques de la zone non saturée et de la végétation, qui influent sur le phénomène d'évapotranspiration, ont été réglés de manière à obtenir des quantités évapotranspirées compatibles avec cette valeur de ET_{cum} . On a donc effectué une étude de sensibilité sur les paramètres agronomiques du modèle de Kristensen et Jensen (Cf. § II-2.2.) et sur les caractéristiques de sol (Cf. § II-2.3.). Le profil de sol le plus répandu sur le bassin du Grand Morin est les limons moyens occupés par des champs (zone des plateaux principalement). C'est donc sur ce profil que l'étude de sensibilité a eu lieu, avec pour base les valeurs des paramètres agronomiques et hydrodynamiques du tableau II-2 ci-dessous.

Symbole	Signification	Valeur
Cint	Capacité d'interception du feuillage	0,1 mm
C1	Paramètre de sensibilité de l'évapotranspiration à l'indice de couverture végétale	0,31
C2	Paramètre caractérisant le transfert hydrique dans le sol	0,2
C3	Paramètre de sensibilité de l'évapotranspiration aux caractéristiques du sol.	20
RDF	Densité racinaire	1
K_s	Conductivité hydraulique à saturation	10^{-7} m.s^{-1}
$\psi(\theta_{fc})$	Tension matricielle à la capacité au champ	0,63 m
$\psi(\theta_w)$	Tension matricielle au point de flétrissement	110 m
b	Exposant de la formule d'Averjanov	9,6

Tableau II-2 : paramètres de référence de l'étude de sensibilité

Les simulations ont été effectuées sur une durée de 4 ans, avec une valeur de précipitation annuelle de 720 mm. La surface de la nappe était supposée située à 2 m sous la surface du sol. Le tableau II-3 montre les résultats de cette analyse. Celle-ci indique que les paramètres les plus sensibles vis à vis du calcul de l'évapotranspiration sont le paramètre C2 du modèle de Kristensen et Jensen, ainsi que les paramètres de la courbe $K(\theta)$ du sol. C'est donc sur ces paramètres qu'a porté le réglage. En raison de leur nature limoneuse, la perméabilité à saturation adoptée pour les sols des plateaux est de 10^{-7} m.s^{-1} , ce qui concorde avec l'estimation obtenue à partir de la composante texturale de ces sols (Rawls et Brakensiek, 1983).

Le tableau II-3 rassemble les valeurs d'évapotranspiration annuelle obtenues lors de l'étude de sensibilité.

Cint (mm)	C1	C2	C3	RDF	K_s (m.s^{-1})	$\psi(\theta_{fc})$ (m)	$\psi(\theta_w)$ (m)	b	ET mm.an^{-1}	variation relative
0,1	0,31	0,2	20	1	10^{-7}	0,63	11,2	9,6	375	0
0,5	0,31	0,2	20	1	10^{-7}	0,63	11,2	9,6	400	+ 6,5%
0,1	0,6	0,2	20	1	10^{-7}	0,63	11,2	9,6	390	+ 4%
0,1	0,31	0,5	20	1	10^{-7}	0,63	11,2	9,6	440	+ 17%
0,1	0,31	0,2	30	1	10^{-7}	0,63	11,2	9,6	375	0
0,1	0,31	0,2	20	2	10^{-7}	0,63	11,2	9,6	375	0
0,1	0,31	0,2	20	1	5.10^{-7}	0,63	11,2	9,6	276	- 26%
0,1	0,31	0,2	20	1	10^{-7}	0,1	11,2	9,6	330	+ 9%
0,1	0,31	0,2	20	1	10^{-7}	0,63	3,0	9,6	355	- 5%
0,1	0,31	0,2	20	1	10^{-7}	0,63	11,2	5	290	- 23%

Tableau II-3 : influence des paramètres de modélisation sur l'évapotranspiration calculée ET

Le réglage des paramètres du modèle d'évapotranspiration a porté principalement sur les paramètres Cint et C2, qui se sont révélés les plus influents sur la valeur de l'évapotranspiration calculée. On notera que la valeur de 0,5 mm adoptée ici pour Cint est assez différente de la valeur de 0,1 mm donnée par Kristensen & Jensen (1975). Cette valeur était cependant nécessaire pour obtenir un taux suffisant d'évaporation à partir de la fraction interceptée.

Le réglage des propriétés hydrodynamiques des sols a porté sur la conductivité hydraulique à saturation: cette dernière, sujette en général à une importante variabilité spatiale (Cf. chapitre IV), influe notablement sur l'évapotranspiration calculée.

Le tableau II-4 ci-dessous rassemble les valeurs d'évapotranspiration annuelle obtenues pour chaque combinaison entre les types de sol et de couverture végétale. Ces valeurs ont été calculées en effectuant une moyenne, sur les 4 ans simulés, de l'évapotranspiration calculée par le modèle de Kristensen et Jensen.

Il ne faut cependant pas perdre de vue qu'elles ont été obtenues pour une distance surface du sol-nappe bien particulière (2 m), qui nous apparaissait reproduire des conditions représentatives de l'état hydrique des sols du bassin. Il s'agit donc ici de valeurs moyennes, que l'on ne retrouvera pas forcément en tout point du bassin.

Végétation	Cint	C1	C2	C3	RDF	Type de sol	ET (mm.an ⁻¹)
Cultures	0,5	0,3	0,5	20	1,0	Limons moyens	485
						Limons anciens	545
						Limons colluviaux	575
Bosquets						Limons moyens	440
						Limons anciens	485
						Limons colluviaux	510
Forêt						Limons moyens	410
						Limons anciens	460
						Limons colluviaux	490

Tableau II-4: évapotranspiration moyenne annuelle pour les différents types de zone non saturée avec les paramètres retenus

Le tableau II-5 ci-dessous rassemble les paramètres hydrodynamiques retenus pour les quatre types de sol présents dans le modèle.

	Limons anciens	Limons moyens	Limons colluviaux	Zone urbaine
K_s (m.s ⁻¹)	5.10^{-8}	2.10^{-7}	5.10^{-7}	10^{-8}
$\psi(\theta_{fc})$ (m)	0,63	0,40	0,40	0,63
$\psi(\theta_w)$ (m)	15	10	10	15
b	10	9	9	10

Tableau II-5 : caractéristiques hydrodynamiques des sols

III-3.3.3. Estimation de l'épaisseur de la nappe alluviale: critère de bilan

Le critère de bilan sur les débits en rivière au niveau de Pommeuse sur le Grand Morin a également servi à déterminer l'épaisseur de la nappe alluviale, qui nous était inconnue. En effet, la nappe alluviale, située en fond de vallée du Grand Morin, draine la nappe de Champigny et interagit avec la rivière. Cependant, la proportion entre le débit qui s'écoule dans la rivière et celui qui circule dans la nappe alluviale est déterminé par la géométrie de la nappe: plus son substratum est situé en profondeur, plus le débit en rivière va être faible (en effet, la surface piézométrique dans la nappe s'abaisse, ce qui, à niveau égal dans la rivière, entraîne une vidange de la rivière dans la nappe). Nous avons donc procédé comme suit: nous avons utilisé les seuls modules d'écoulement dans la nappe et dans le réseau fluvial, en imposant comme valeur de la recharge de la nappe une valeur constante et homogène, la recharge moyenne obtenue après réglage de l'évapotranspiration. Cette utilisation permet un gain de temps important, en raison de l'abandon du couplage entre les zones non saturée et saturée dans la résolution des équations de l'écoulement. Lorsque le régime permanent est atteint dans la nappe, nous avons relevé le débit simulé à Pommeuse et nous l'avons comparé au débit moyen effectivement mesuré. La cote du substratum de la nappe alluviale a été ajustée jusqu'à obtenir égalité des deux valeurs.

Le tableau II-6 illustre la sensibilité du débit simulé à Pommeuse à l'épaisseur de la nappe alluviale.

Epaisseur (m)	Débit (m ³ .s ⁻¹)
5	10
7,5	5,5
10	4

Tableau II-6: Débit mesuré en rivière en fonction de l'épaisseur de la nappe

III-3.3.4. Estimation des conductivités à saturation des sols: critère dynamique

Il existe deux origines possibles au ruissellement lors d'épisodes de pluie. La première cause est une intensité de pluie supérieure à la conductivité à saturation du sol: le sol saturé ne pouvant évacuer par infiltration un flux supérieur à sa conductivité, l'eau excédentaire ruisselle. Ce mécanisme est connu sous le nom de ruissellement Hortonien. La seconde origine possible est la remontée, à la suite d'épisodes pluvieux longs mais non forcément intenses, de la surface de la nappe jusqu'au niveau du sol. Ce type de ruissellement porte le nom de ruissellement de Dunne.

Il est difficile, lorsque l'on ne possède pas d'information sur l'état hydrique préalable du sol, de déterminer si le ruissellement consécutif à un épisode pluvieux est d'origine Hortonienne

ou s'il s'agit d'un ruissellement de Dunne. Cependant, lorsqu'il apparaît presque immédiatement après le début d'un épisode pluvieux qui par ailleurs fait suite à une période sèche de plusieurs jours, il est fort peu probable qu'il soit lié à une remontée de la nappe: la seule explication qui reste est le mécanisme Hortonien.

La mesure de pics de ruissellement Hortonien, associée à celle de la pluie sur un bassin versant, peuvent permettre de déterminer un ordre de grandeur des conductivités à saturation du sol sur ces bassins versants: si K_s est la conductivité à saturation du sol sur le bassin considéré, si S_b (m^2) est la superficie de ce bassin, en notant P ($m.s^{-1}$) l'intensité de pluie mesurée et Q_{ex} ($m^3.s^{-1}$) le débit mesuré à l'exutoire du bassin, on obtient par un bilan de flux sur les eaux de surface (en négligeant l'évaporation et la variation de stock):

$$Q_{ex} = S_b (P - K_s) \quad (II.9.a)$$

$$K_s = P - \frac{Q_{ex}}{S_b} \quad (II.9.b)$$

Remarquons toutefois que pour que ce bilan soit pertinent, il faut que les épisodes de pluie et de ruissellement soient suffisamment importants: si leur durée est inférieure au temps de concentration du bassin, le pic de débit de ruissellement va être aplati par diffusion de l'hydrogramme. En outre, ne disposant que d'enregistrements journaliers pour la pluie, nous ne pouvons considérer que des épisodes automnaux ou hivernaux. En effet, les épisodes pluvieux d'étés peuvent être concentrés sur une ou deux heures seulement (orages locaux), mais impliquer des intensités de pluie très fortes, ce que les données disponibles ne permettent pas de déceler.

Nous avons donc utilisé pour le bilan de flux des épisodes pluvieux des mois d'hiver de la période 1980-1990. Ce bilan a été effectué sur le bassin versant du Grand Morin à Pommeuse, dont la superficie S_b est de 800 km^2 environ. Le débit mesuré Q_{lim} provient des enregistrements journaliers relevés par le Service des Voies Navigables. Le tableau II-7, qui rassemble les résultats des estimations, montre une assez bonne concordance pour les valeurs de la conductivité hydraulique à saturation sur le bassin versant du Grand Morin à Pommeuse.

Le bassin concerné étant constitué principalement des plateaux de la partie amont du bassin du Grand Morin, nous pouvons supposer que les valeurs trouvées pour la conductivité à saturation sont assez représentatives de celle des limons moyens, qui composent en majorité le sol des plateaux.

Nous obtenons par cette méthode une estimation moyenne de $K_s = 2.10^{-7} \text{ m.s}^{-1}$, ce qui est en bon accord avec l'ordre de grandeur des valeurs adoptées lors du réglage de la composante d'évapotranspiration.

Date de l'épisode	P (mm.h^{-1})	Q ($\text{m}^3.\text{s}^{-1}$)	K_s (m.s^{-1})
Janvier 1980	0,7	26	$1,55.10^{-7}$
Février 1981	0,7	30	$1,4.10^{-7}$
Février 1983	0,8	32	$1,7.10^{-7}$
Janvier 1990	0,7	20	$1,7.10^{-7}$
Février 1990	1,2	64	$2,5.10^{-7}$
Mars 1991	1,0	30	$2,4.10^{-7}$

Tableau II-7: estimations de la conductivité hydraulique à saturation des sols obtenues par calage du ruissellement

Hortonien

III-3.3.5. Estimation de la porosité de la nappe des calcaires de Champigny: critère dynamique

L'enquête du BURGEAP (1993) et Mégnien (1979) fournissent des valeurs de la porosité de l'aquifère de Champigny. La porosité est un facteur important pour les calculs de transport. Il peut donc être utile de vérifier que les valeurs de porosité fournies au modèle ne conduisent pas à des fluctuations aberrantes des niveaux piézométriques dans les aquifères.

La valeur de la porosité de l'aquifère influe sur celle du coefficient d'emmagasinement. En effet, si l'on néglige les volumes d'air captifs dans la zone saturée, la porosité de l'aquifère est égale à sa teneur volumique en eau à saturation, dont dépend (Cf. § II-2.4.) le coefficient d'emmagasinement.

L'équation (II.6) montre que plus la porosité d'un aquifère est faible, plus celui-ci réagit rapidement aux perturbations temporelles, en particuliers aux fluctuations de la recharge.

Une méthode de calage de la porosité peut consister en la comparaison des fluctuations saisonnières des hauteurs piézométriques simulées et mesurées dans l'aquifère en question. Cependant, il n'existe pas de relevés piézométriques dans la nappe de Champigny au niveau du bassin du Grand Morin. Nous pouvons alors tenter de comparer les fluctuations simulées et mesurées dans la nappe de Champigny, mais en des endroits différents (BRGM, 1994), en supposant que les caractéristiques des calcaires de Champigny sont assez homogènes dans l'espace pour que la comparaison soit pertinente. Nous disposons de suivis piézométriques non perturbés (BRGM, 1994) dans l'aquifère de Champigny en deux endroits différents, dont aucun n'est situé sur le bassin (figure II-10). Toutefois, les relevés montrant une grande différence de comportement suivant les sites (figure II-11), une comparaison avec la piézométrie simulée du modèle du Grand Morin ne serait pas pertinente: des mesures sur le bassin même sont nécessaires.

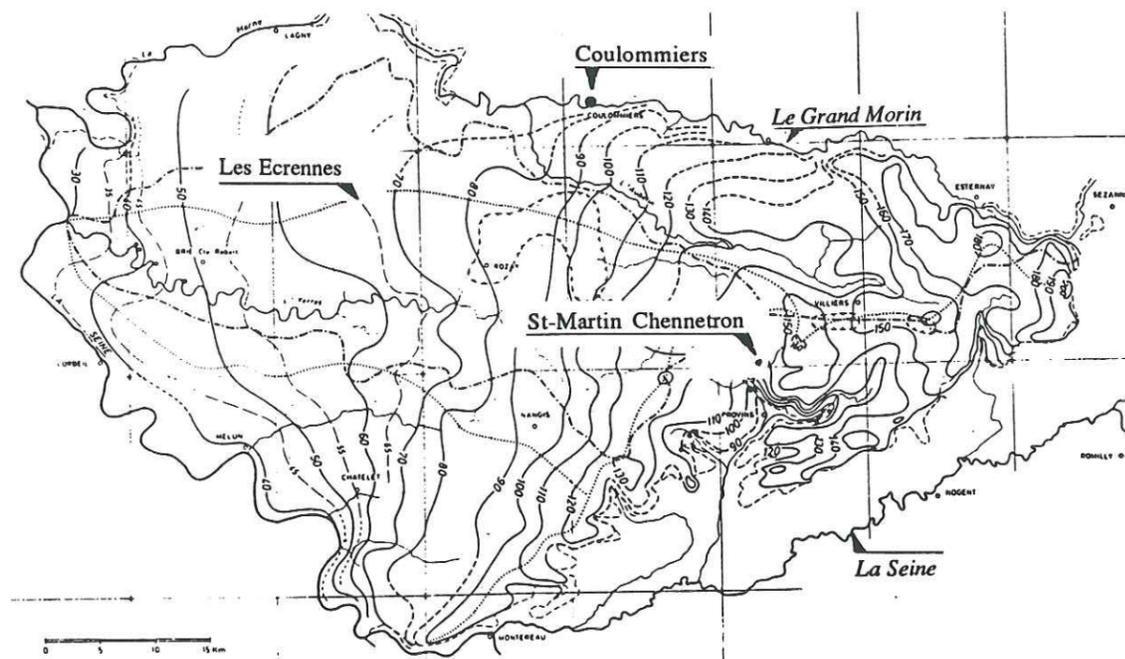


Figure II-10: Position des piézomètres dans l'aquifère de Champigny

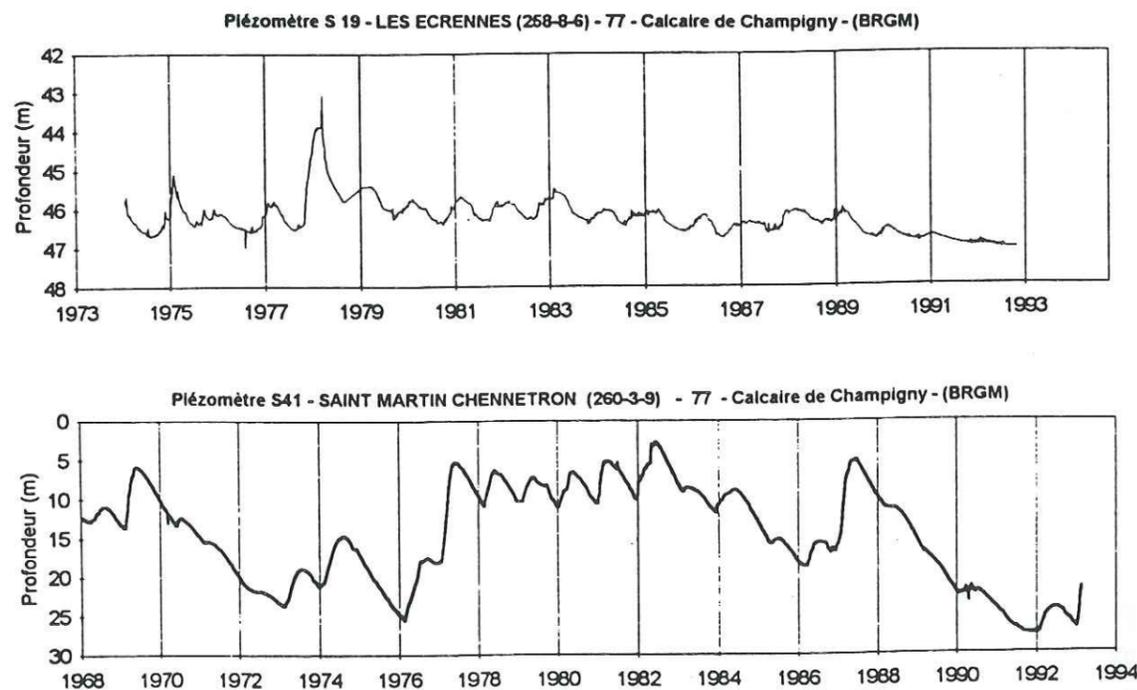


Figure II-11: Piézométrie mesurée (d'après BRGM, 1994)

II-3.4. Critères pertinents pour le réglage du modèle MIKE SHE d'un bassin versant de taille moyenne

Nous avons, pour cette modélisation, disposé de données fort peu nombreuses. En particulier, on peut remarquer que nos buts étant principalement l'utilisation d'un modèle de nappe, nous ne disposons paradoxalement pas, au début de la construction du modèle, de données sur le comportement de ces nappes. Des critères pertinents pour la modélisation auraient pu être tirés de mesures piézométriques du niveau naturel des aquifères (et non pas des essais de pompage), qui auraient permis de déterminer les gradients hydrauliques dans ces nappes.

Nous avons vu que les mesures de débit en rivière permettent de tirer des renseignements sur le comportement, tant moyen que dynamique, du bassin versant du Grand Morin. Le bilan que nous avons effectué en utilisant les débits en rivière n'est valable que dans la mesure où la vallée du Grand Morin draine la quasi-totalité des écoulements en nappe. Nous verrons par la suite (§ II-4.3.3.) qu'un tel critère de bilan est inapplicable dans le cas d'une rivière dont l'alimentation par la nappe est faible, les écoulements en aquifère participant alors à une fraction non négligeable des bilans hydriques sur le bassin. Il ne faut pas non plus perdre de vue que le critère de bilan n'est applicable que dans la mesure où l'on dispose de chroniques suffisamment longues pour pouvoir négliger les variations de stock dans les aquifères et dans la rivière: la présence d'ouvrages de régulation ou de bassins de retenue peut en effet modifier les stocks contenus dans les différents biefs du réseau fluvial.

II-4. MODELISATION DU BASSIN VERSANT DU VANNETIN

Les paramètres d'évapotranspiration et de la zone non saturée ont été repris d'après les valeurs déterminées sur le modèle du Grand Morin. Le modèle du bassin versant du Vannetin a permis d'estimer les conductivités hydrauliques des couches géologiques présentes dans le modèle.

II-4.1. Description du site

Le bassin du Vannetin est un sous-bassin du bassin du Grand Morin. Sa superficie est planimétrée à 35 km². Le Vannetin est un affluent en rive gauche du Grand Morin en amont de Coulommiers. L'agglomération principale du bassin est Choisy-en-Brie, dont les captages en aquifère font l'objet de nos travaux.

II-4.2. Données disponibles et choix de modélisation

II-4.2.1. Structure du modèle

Le maillage du modèle sur ce bassin est plus fin que celui du modèle sur le Grand Morin (200 mètres de côté). Les trois entités géologiques principales (aquifères de Brie et de Champigny, marnes supragypseuses) du Grand Morin sont également représentées dans cette modélisation locale.

II-4.2.2. Méthodologie de modélisation

Par rapport au bassin du Grand Morin, aucune donnée supplémentaire n'était disponible sur le Vannetin. Ce bassin étant de taille plus réduite, une enquête de terrain plus poussée a été réalisée. En particulier, le réseau fluvial a fait l'objet de relevés plus précis que sur le Grand Morin. Les paramètres d'évapotranspiration et les caractéristiques de sol ont été repris du modèle du Grand Morin. De même, les conditions aux limites dans les aquifères ont été déduites des calculs effectués sur le modèle du Grand Morin. Il restait à connaître les paramètres hydrodynamiques des aquifères et de la couche de marnes, qui déterminent le comportement des deux aquifères - et en particulier le champ de vitesses dans la nappe de Champigny.

La détermination de ces paramètres a été effectuée suivant une méthode itérative:

- dans un premier temps, on modifie les paramètres hydrodynamiques dans le modèle du Grand Morin (exemple: augmentation de la conductivité en aquifère pour abaisser la piézométrie); une simulation est effectuée avec ce modèle, qui fournit des conditions aux limites pour le bassin du Vannetin;
- une simulation, utilisant ces conditions aux limites et les paramètres hydrodynamiques modifiés, est effectuée sur le bassin du Vannetin. Des résultats de simulation, on déduit de nouvelles valeurs des paramètres hydrodynamiques afin d'améliorer le réglage. Ces paramètres modifiés sont introduits dans le modèle du Grand Morin, sur lequel une nouvelle simulation est effectuée.

Ces deux étapes sont répétées tant que le comportement du modèle n'est pas jugé satisfaisant. Les critères d'estimation du comportement du modèle sur le bassin du Vannetin sont détaillés dans le paragraphe II-4.3.

II-4.3. Réglage du modèle sur le bassin versant du Vannetin

L'utilisation couplée du modèle sur les bassins du Grand Morin et du Vannetin a permis d'estimer les conductivités hydrauliques de la couche des marnes et des deux aquifères. Nous disposons de données sur les perméabilités (Mégny, 1979; BURGEAP, 1993), qui sont rassemblées dans le tableau II-8. Cependant, les mesures laissent apparaître des incertitudes et/ou une forte variabilité spatiale de ces conductivités hydrauliques. En outre, la perméabilité de la couche de marnes nous était inconnue. Le calage était donc une étape nécessaire. De la transmissivité mesurée dans la nappe de Champigny, en se fondant sur une épaisseur moyenne de la nappe d'une vingtaine de mètres dans les calcaires de Champigny, on peut déduire une valeur de $K_s = 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$ ou plus. Nous sommes donc partis de cette base pour les premières simulations.

Aquifère	Coefficient d'emmagasinement	Perméabilité (m.s^{-1})	Transmissivité ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$)
Calcaires de Brie	4 %	10^{-5} à 5.10^{-5}	6.10^{-5} à 2.10^{-4}
Calcaires de Champigny	Moyenne 5%	-	Moyenne $2,6.10^{-3}$

Tableau II-8: conductivités hydrauliques des aquifères de Brie et de Champigny (d'après Mégny, 1979)

Nous avons également adopté des valeurs homogènes pour les perméabilités de chaque formation géologique. Bien qu'une telle hypothèse soit loin de correspondre toujours à la réalité (de Marsily, 1993), nous ne pouvions, en l'absence de données supplémentaires, intégrer la variabilité spatiale des conductivités à ce stade de la modélisation.

II-4.3.1. Réglage de la conductivité hydraulique de la couche de marnes

Le réglage de la conductivité de la couche de marnes a été effectué en considérant les puissances des deux aquifères (donc leur stock). En effet, la nappe de Champigny est alimentée par deux mécanismes: l'infiltration directe des eaux ruisselées (au niveau des vallées) et la vidange de la nappe de Brie à travers la couche de marnes (au niveau des plateaux). La zone des plateaux couvrant 700 à 800 km^2 sur les 1200 km^2 du bassin du Grand Morin, la recharge par vidange de l'aquifère de Champigny joue un rôle non négligeable dans l'alimentation de la nappe de Champigny. Par conséquent, la perméabilité verticale de la couche de marnes constitue un paramètre de réglage essentiel. En effet, si la perméabilité des marnes augmente, la nappe de Brie va se vidanger davantage dans la nappe de Champigny; si elle diminue, la nappe de Champigny va avoir tendance à se vider, car, les marnes empêchant la vidange, l'aquifère de Brie va s'écouler dans le réseau fluvial. Divers essais ont permis de déterminer une valeur pour la conductivité hydraulique verticale des marnes, telle que

Morin, permettent d'effectuer un premier réglage sur les conductivités hydrauliques des diverses couches géologiques. En effet, l'apparition d'eau dans un ruisseau signifie que le niveau piézométrique de la nappe sous-jacente est remonté jusqu'au fond de ce ruisseau.

De même, le bassin du Vannetin comporte dans sa partie amont un fossé qui reçoit les eaux du réseau de drainage des plateaux. Les riverains indiquent que ce fossé est en eau durant la moitié de l'année (d'octobre à mars-avril). On peut donc en déduire que, durant cette partie de l'année, la nappe des calcaires de Brie remonte au niveau de ce fossé dans sa partie amont (qui n'est pas alimentée par le réseau de drainage). Cette indication nous a permis de déterminer les conductivités dans la nappe des calcaires de Brie, pour lesquelles on a adopté une valeur de $2,5 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$. Pour la nappe de Champigny, la valeur adoptée est $3 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$, qui seule permet une élévation suffisante de la nappe de Brie pour que les fossés de drainage ne soient pas alimentés de façon permanente, mais pour que la source du Vannetin le soit. Ce critère de caractère saisonnier des cours d'eau peut être utilisé chaque fois qu'une nappe est susceptible de remonter au niveau d'un cours d'eau ou de la surface du sol (source saisonnière).

III-4.3.3. Réglage des conductivités hydrauliques en aquifère: critère de bilan

Dans la même optique que le paragraphe II-3.3.3., on pouvait être tenté d'appliquer un critère de bilan sur les débits des rivières du bassin du Vannetin, afin de déterminer des paramètres tels que la conductivité hydraulique en aquifère. Or, nos simulations ont montré qu'à conductivité hydraulique d'aquifère égale, l'abaissement de 1 mètre, dans le modèle, des cotes du lit du Vannetin conduit à passer d'un débit de base dans la rivière de 50 l.s^{-1} à 300 l.s^{-1} . Or, la précision des cartes IGN à partir desquelles notre modèle a été construit est de l'ordre du mètre. Par conséquent, ce critère est inutilisable dans le cas d'une nappe en faible interaction avec la rivière. De plus, dans un bassin versant de petite taille, les limites des bassins versants géologique et topographique ont moins de chance de coïncider que dans un bassin de grande taille: le bilan des flux transitant par les aquifères peuvent ne pas être négligeables par rapport aux quantités évacuées par la rivière. La détermination de tels flux peut nécessiter des moyens d'investigation importants, que l'on ne mettra pas forcément en oeuvre pour de petits bassins.

II-4.4. Critères pertinents pour le réglage du modèle MIKE SHE d'un bassin versant de petite taille

Les critères pertinents pour le réglage de modèles de petits bassins versants ne sont pas les mêmes que pour des bassins de grande taille:

- il n'est pas toujours aisé d'effectuer un bilan hydrologique sur ces bassins (Cf. ci-dessus, § II-4.3.3.);

- les critères dynamiques d'affleurement des nappes y seront sans doute plus significatifs: du fait d'une discrétisation plus précise du bassin, les mouvements de la nappe et ses interactions avec le réseau fluvial y sont mieux représentés;
- les critères de calage sur le ruissellement Hortonien sont plus significatifs sur un bassin de petite taille: du fait d'un temps de concentration plus faible, la diffusion de l'onde de ruissellement est moins importante que sur les bassins de grande taille;

II-5. ELEMENTS DE VALIDATION, LIMITATIONS DE LA MODELISATION ET DU LOGICIEL

II-5.1. Rappels sur la notion de validation

Dans un considérable effort de synthèse, Kauark-Leite (1990, p.58), en accord avec Beck (1988), détermine les principales caractéristiques d'un modèle validé:

- a) les paramètres du modèle doivent être invariables dans le temps; nous verrons cependant (Cf. § II-5.3.2.) que dans le cas de simulations où interviennent des échelles de temps importantes, le respect de cette propriété ne doit pas être considéré comme nécessaire; de plus, on peut citer comme contre-exemple à ce critère le cas des modifications d'origine anthropique, qui peuvent conduire à prendre en compte une variabilité dans le temps de certains paramètres.
- b) la variance des paramètres doit être suffisamment faible, ce qui permet de les identifier; nous verrons plus loin que, dans le cadre d'un processus de validation au sens de de Marsily (1994), cette condition n'est absolument plus nécessaire dans la mesure où l'on dispose d'une description *statistique* des paramètres du modèle;
- c) les écarts résiduels entre variables simulées et observées doivent être faibles, et ne doivent pas résulter de l'effet de processus causaux, non aléatoires.

Nous ajouterons quant à nous les conditions suivantes:

- d) le critère de validation doit être *représentatif* des phénomènes modélisés, il doit correspondre aux objectifs de la modélisation. Rappelons en effet, en citant Kauark-Leite (1990, p. 59), que "*l'objectif d'un modèle n'est pas d'ajuster sa réponse aux*

données expérimentales, mais de répondre aux questions qui ont donné lieu à sa mise en oeuvre ou son utilisation".

- e) Le modèle doit être mis en oeuvre sur des échelles de temps compatibles avec ses temps de réponse caractéristiques. Nous verrons par exemple (Cf. § II-5.3.1.) que, faute de données, ce critère peut souvent ne pas être respecté dans la modélisation de bassins de grande taille.

II-5.2. Eléments de réglage et de validation

II-5.2.1. Choix du critère de réglage/validation

Les données dont nous disposons à l'heure actuelle sont les mesures de débit en rivière au niveau de Pommeuse, sur le Grand Morin (Service des Voies Navigables) et des relevés piézométriques dans les aquifères (Mégnyen, 1979). La carte donnée par Mégnyen ne couvre cependant qu'une partie du bassin du Grand Morin, elle ne tient pas compte de la coupure de l'aquifère par le cours d'eau du Grand Morin, elle n'est établie que pour une date donnée. Le seul critère dont nous pouvions tester pratiquement l'application était le débit en rivière au niveau de la station de Pommeuse, la disponibilité d'une grande période d'observations étant nécessaire pour une validation quantitative (Kauark-Leite, 1990 pp. 60-63; de Marsily, 1994). Rappelons que la période que nous avons utilisée pour le réglage du modèle est celle qui s'étend des années 1987 à 1990 incluses. Cette période a été choisie car elle reproduit les conditions hydrologiques moyennes observées sur la plus longue période d'enregistrements dont nous disposons, et qui peut être considérée par conséquent comme le "régime hydrologique moyen" du bassin. La période de validation de la modélisation doit bien sûr être différente de la période de calage. Nous avons choisi pour cela la période allant des années 1984 à 1986.

II-5.2.2. Résultats de réglage et de validation

Réglage

La qualité du réglage du modèle a été estimée selon les méthodes exposées par Kauark-Leite (1990, pp. 58-66): nous avons procédé à une analyse quantitative et qualitative des critères d'ajustement. Pour la clarté de l'exposé, les résultats d'analyse sont présentés en annexe AII à ce mémoire. Nous nous contentons d'exposer ici les résultats les plus illustratifs.

Les figures II-13.a et II-13.b présentent les débits simulé et observé à la station de Pommeuse pour la période de réglage.

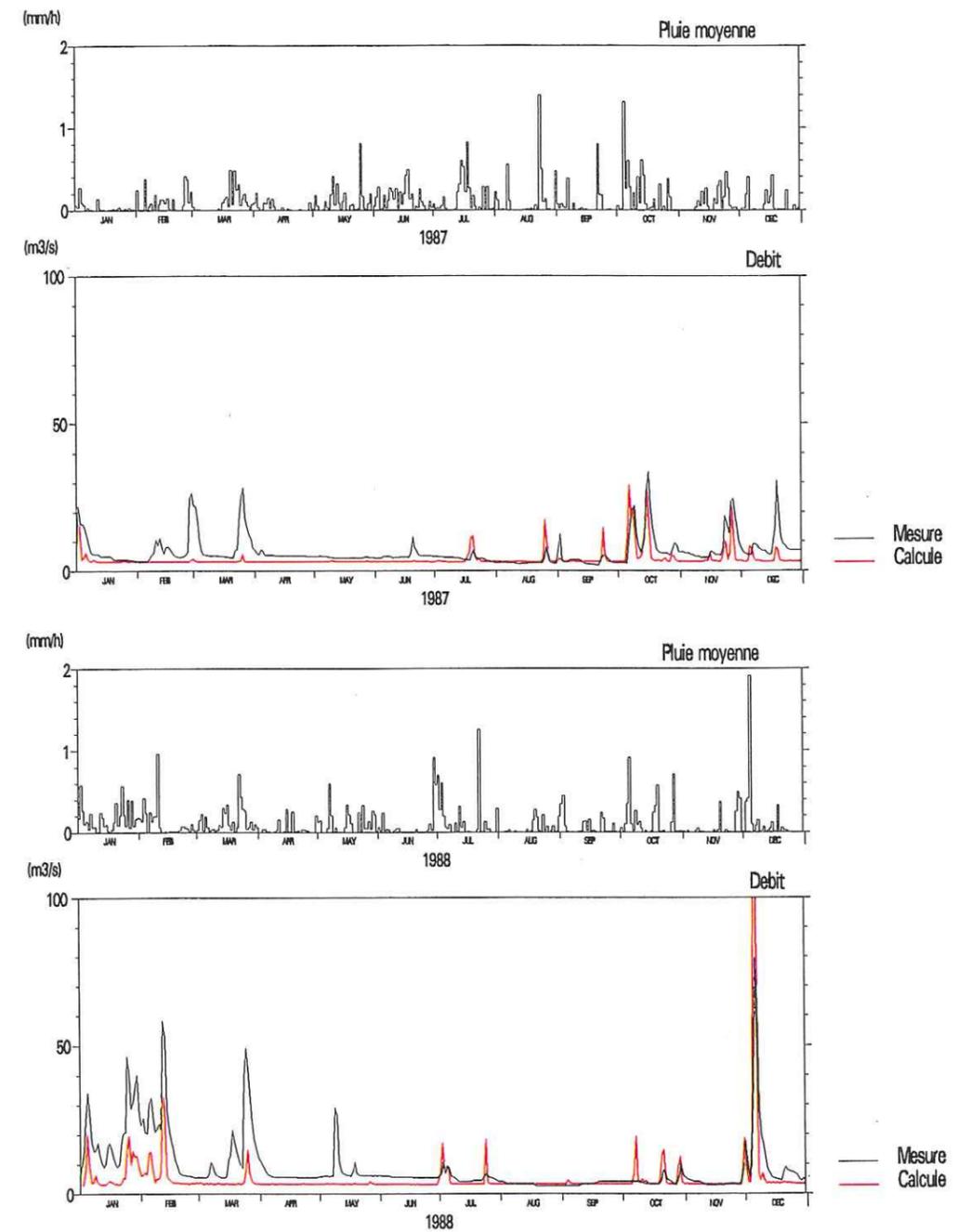


Figure II-13.a: Débits observés et simulés à Pommeuse sur la période 1987-1988

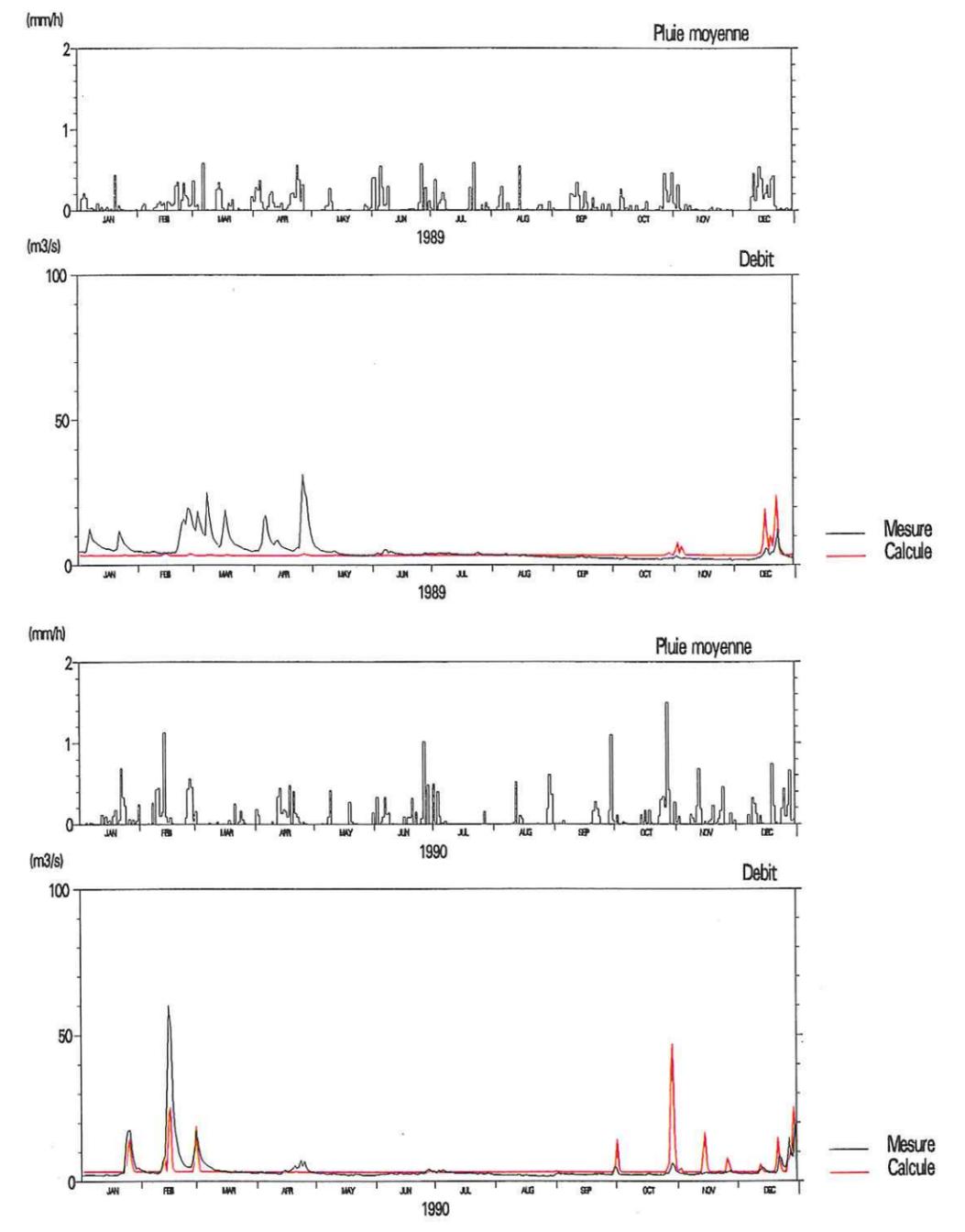


Figure II-13.b: Débits observés et simulés à Pommeuse sur la période 1989-1990

Elles suscitent les remarques suivantes:

- sauf sur quelques périodes exceptionnelles (octobre et novembre 1987, décembre 1990), les pointes de débit calculées et observées ne sont pas du même ordre de grandeur.
- Il arrive souvent qu'une pointe dans le débit observé ne soit pas calculée par le modèle (exemples: février-mars 1987, mai 1988, février à mai 1989): de tels événements se produisent en particulier lors de pluies faibles mais ininterrompues tombant sur de longues périodes (par exemple janvier à mai 1988).
- Il arrive également que le modèle surestime le débit par rapport à la réalité (exemples: juillet et décembre 1988, octobre 1990). On remarquera que les périodes où le modèle surestime les pointes de débit font suite à des pluies relativement violentes (précipitation journalière: 30 mm pour la pointe de juillet 1988, 45 mm pour celle de décembre 1988, 36 mm pour celle d'octobre 1990).
- Le modèle ne parvient pas à restituer le comportement saisonnier des débits observés: alors que l'on constate en général une augmentation du débit de base observé en période printanière puis sa diminution à partir de l'été, celui du modèle reste pratiquement constant sur toute la durée de la simulation.

Les résultats d'analyse rassemblés en annexe AII confirment ces observations (Cf. figures AII-2 à AII-8 de l'annexe AII):

- Les débits calculés sous-estiment les débits observés pendant les deux premières années de la période de calage (figure AII-2). On notera en particulier la période allant d'octobre 1987 à mars 1988, où l'erreur de simulation et son résidu cumulé (figures AII-2.a et AII-2.b, AII-3.a à AII-3.c) prennent des valeurs élevées par rapport à l'ensemble de la période de calage. On notera (Cf. figure AII-2.c) que l'erreur relative est en général peu importante sur la période 1987-1988. Ceci provient du fait que les plus grandes valeurs de l'erreur se rencontrent pour des débits également élevés. Les deux années 1987 et (plus particulièrement) 1988 sont des années de pluies peu intenses mais très fréquentes. Ceci tend à indiquer que le modèle ne simule pas correctement les épisodes de ruissellement de Dunne.
- Le caractère saisonnier des débits observés n'est pas respecté par le modèle (Cf. figure AII-3). Les figures AII-3.a et AII-3.d illustrent bien le fait que le débit calculé reste

la plupart du temps égal à une valeur constante, sauf pour de courtes périodes correspondant aux épisodes de crue.

- La figure AII-4 montre les propriétés statistiques des débits mesurés et simulés sur les années 1987 à 1990. Les statistiques ont été effectuées sur deux échantillons: le premier (figure AII-4 (a)) comprend toutes les valeurs de débit de janvier à décembre sur les 4 ans. Le second (figure AII-4 (b)) ne comprend que les mois de janvier et février. Les débits simulés en janvier et février tendent à sous-estimer (en moyenne) les débits mesurés. De même, la dynamique (traduite par l'écart-type) de ces débits simulés sous-estime celle des débits observés. Les valeurs moyennes et l'écart-type des débits simulés et mesurés s'accordent mieux lorsque l'on prend en compte l'année entière dans les statistiques. Il apparaît donc que les périodes hivernales sont plus mal modélisées que les périodes printanières et estivales. Ces périodes étant précisément celles où les précipitations sont peu intenses mais fréquentes, ce résultat semble confirmer une mauvaise modélisation du ruissellement de Dunne.

Validation

Sur la figure II-14, qui montre, pour les années 1984 à 1986 (période de validation), les débits simulés et mesurés à Pommeuse, on peut faire plusieurs observations:

- les pointes de débit observés sont bien restituées en 1984. En revanche, on observe en 1985 et 1986 une grande différence avec les valeurs simulées.
- il arrive souvent, au cours de la même année, qu'une pluie génère une crue violente dans la réalité et que le modèle ne restitue pas cette crue (mars et avril 1986 par exemple), alors que plus tard dans l'année, le modèle surestime un débit en rivière par rapport à la réalité (septembre à novembre 1986).

On remarquera dans les débits mesurés, des périodes où les évolutions semblent peu "naturelles": ceci est probablement lié à la présence de nombreux ouvrages sur le cours de la rivière, qui ont pu être manoeuvrés dans un but d'écrêtement des crues.

De plus, il ne faut pas perdre de vue que l'importance des débits en rivière dépend de la position de la nappe au voisinage de celle-ci. Une modification de la position de la nappe peut modifier les débits simulés de manière importante. Ceci a été mis en évidence au paragraphe II-3.3.3., où une modification du substratum de la nappe alluviale, causant une modification de sa piézométrie, entraînait un changement dans les débits calculés.

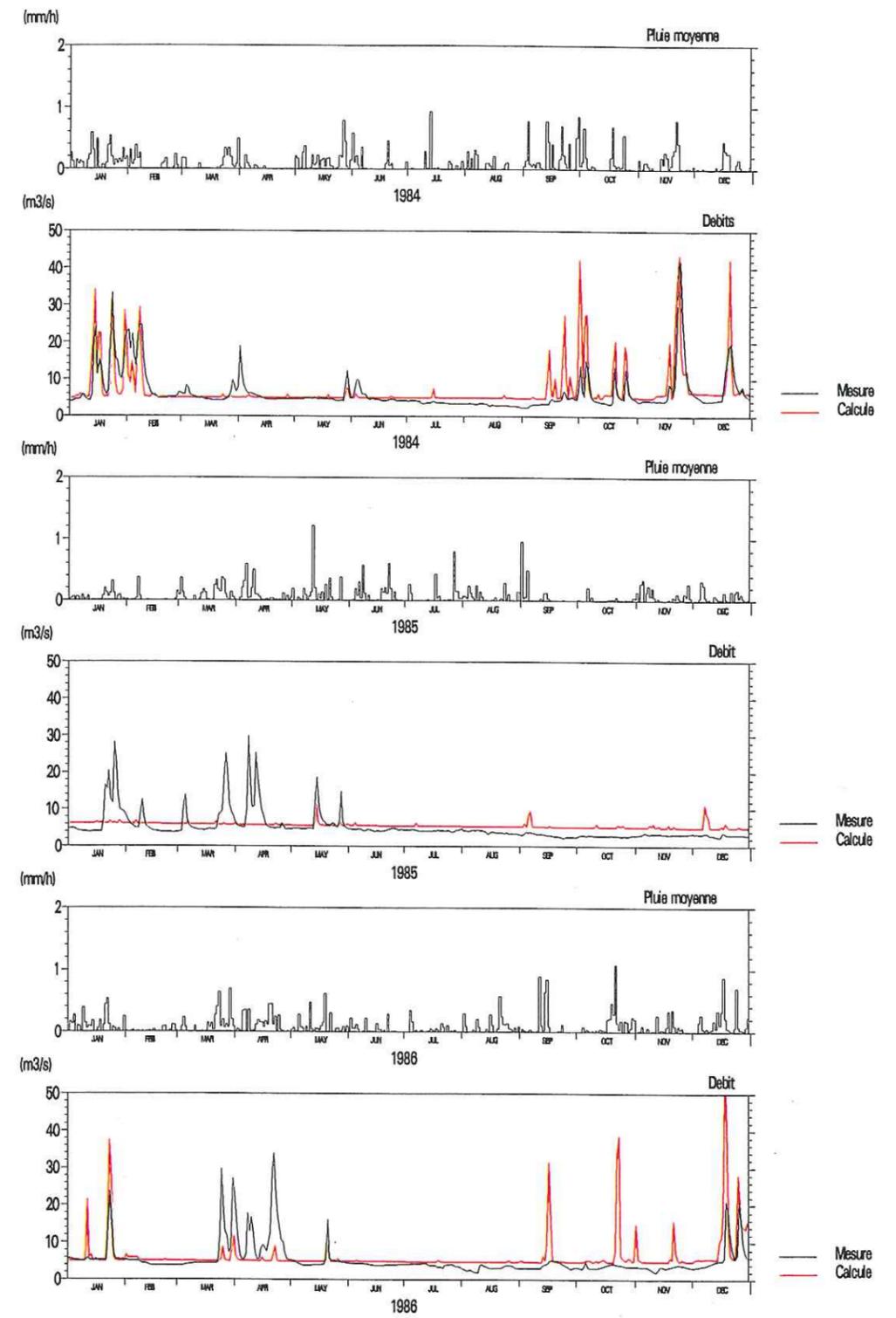


Figure II-14: Débits observés et simulés à Pommeuse sur la période 1984-1986

Il faut également reconnaître que les équations prises en compte par MIKE SHE pour les écoulements de surface ne tiennent compte que d'un nombre restreint de phénomènes et que la description des écoulements fluviaux peut paraître trop sommaire pour valider un modèle sur le seul critère fluvial. Ce point sera abordé au paragraphe II-5.2.3.

On peut faire globalement les mêmes remarques pour la validation du modèle que pour son réglage. Les figures AII-5 à AII-20 de l'annexe AII mettent en évidence les points suivants:

L'examen de la figure AII-5 (a) montre une nette différence de comportement entre les débits mesurés et simulés: la plage de variation des débits simulés est nettement plus réduite que celle des débits mesurés, en particulier pour les valeurs faibles: le débit de base simulé ne présente pas de caractère saisonnier, alors que l'on constate dans la réalité une diminution de ce même débit en été et son augmentation en hiver. Cette différence entre observation et simulation est visible également sur les figures AII-13 (a) et (d)

Les figures AII-9 (a) à AII-9 (d) permettent de constater que les débits sont sous-estimés en hiver (en particulier au moment des pointes de crue), alors qu'au printemps et en été, ils sont légèrement surestimés par le modèle. On note, en septembre 1984 et septembre-octobre 1986, une surestimation des pointes associées à deux épisodes pluvieux précédés d'une période humide. De plus, les périodes hivernales sont caractérisées par un accroissement très important de l'erreur, ce qui semble indiquer que les problèmes de modélisation proviennent d'une mauvaise prise en compte des phénomènes propres à la saison humide.

Les figures AII-10 (b) (c) montrent que l'erreur de simulation croît avec le débit mesuré; pour les valeurs faibles du débit, ceci illustre l'absence de composante saisonnière dans les variations de débit. Le même comportement pour les valeurs élevées du débit provient de la mauvaise restitution des débits de pointe évoquée plus haut.

Les figures AII-17 (a) et (b) montrent les propriétés statistiques des débits mesurés et simulés sur les années 1984 à 1986. Les statistiques ont été effectuées sur deux échantillons: le premier (figure AII-17 (a)) comprend toutes les valeurs de débit de janvier à décembre sur les 3 années. Le second (figure AII-17 (b)) ne comprend que les mois de janvier et février. Les débits simulés en janvier et février tendent à sous-estimer (en moyenne) les débits mesurés. De même, la dynamique (traduite par l'écart-type) de ces débits simulés sous-estime celle des débits observés. Les valeurs moyennes et l'écart-type des débits simulés et mesurés s'accordent mieux lorsque l'on prend en compte l'année entière dans les statistiques. Il apparaît donc que les périodes hivernales sont plus mal modélisées que les périodes printanière et estivale.

II-5.2.3. Pertinence des critères de réglage et de validation

La pertinence du critère de calage doit également être discutée: il n'est en effet pas certain que la comparaison des débits simulés en rivière avec les débits observés soit un critère de validation pertinent pour le réglage d'un modèle de nappe. En effet, il convient de rappeler que ces débits ne traduisent, par le biais des interactions avec le réseau fluvial, qu'un comportement *global* des aquifères. Deux remarques doivent être faites:

- pour l'application qui nous occupe (recherche de champs de vitesse et de profondeur de nappe en aquifère au niveau d'un bassin versant de 30 km² environ), le comportement *local* des aquifères revêt autant d'importance que leur comportement global.
- Etant donné le caractère sommaire de la modélisation des échanges nappe-rivière, il n'est pas certain que le système MIKE SHE permette, même avec un très bon réglage des paramètres hydrologiques, de restituer la complexité des variations du débit observé.

La pertinence du débit en rivière en tant que critère de validation a été examinée de la manière suivante:

Nous avons effectué plusieurs simulations sur le bassin du Grand Morin: la première simulation, dite simulation de référence, reprend les paramètres obtenus lors du réglage (§ II-3 et § II-4). Dans la seconde simulation, nous avons modifié la conductivité hydraulique de la nappe des calcaires de Champigny (abaissement de $3 \cdot 10^{-4}$ à 10^{-4} m.s⁻¹); dans la troisième simulation, nous avons modifié le coefficient d'emménagement de cette nappe (augmentation de 5 à 20 %), en reprenant la conductivité de la simulation de référence. Les effets de la modification de ces deux paramètres sont les suivants (figures II-15 à II-17):

- dans la nappe de Champigny, on a effectué le relevé des charges simulées en différents points (figure II-15). On observe, en de nombreux endroits, une nette différence entre la simulation de référence et les simulations avec paramètres modifiés. On constate de manière générale que la diminution de la perméabilité dans l'aquifère amène un rehaussement de la surface piézométrique; en revanche, l'augmentation du coefficient d'emménagement se traduit par l'abaissement de la surface piézométrique. Au niveau du bassin de l'Orgeval (Figure II-16.a), le rehaussement de la surface libre entraîne un dépassement du plancher des marnes supragypseuses, ce qui explique le lissage des courbes pendant certaines périodes.
- Au niveau de la station de Pommeuse, on a comparé les débits simulés pour les trois simulations, avec les débits observés (figure II-17). D'une part, les débits simulés

subissent quasiment les mêmes variations au cours du temps, quelle que soit la simulation. En revanche, ils restent toujours très différents des débits mesurés.

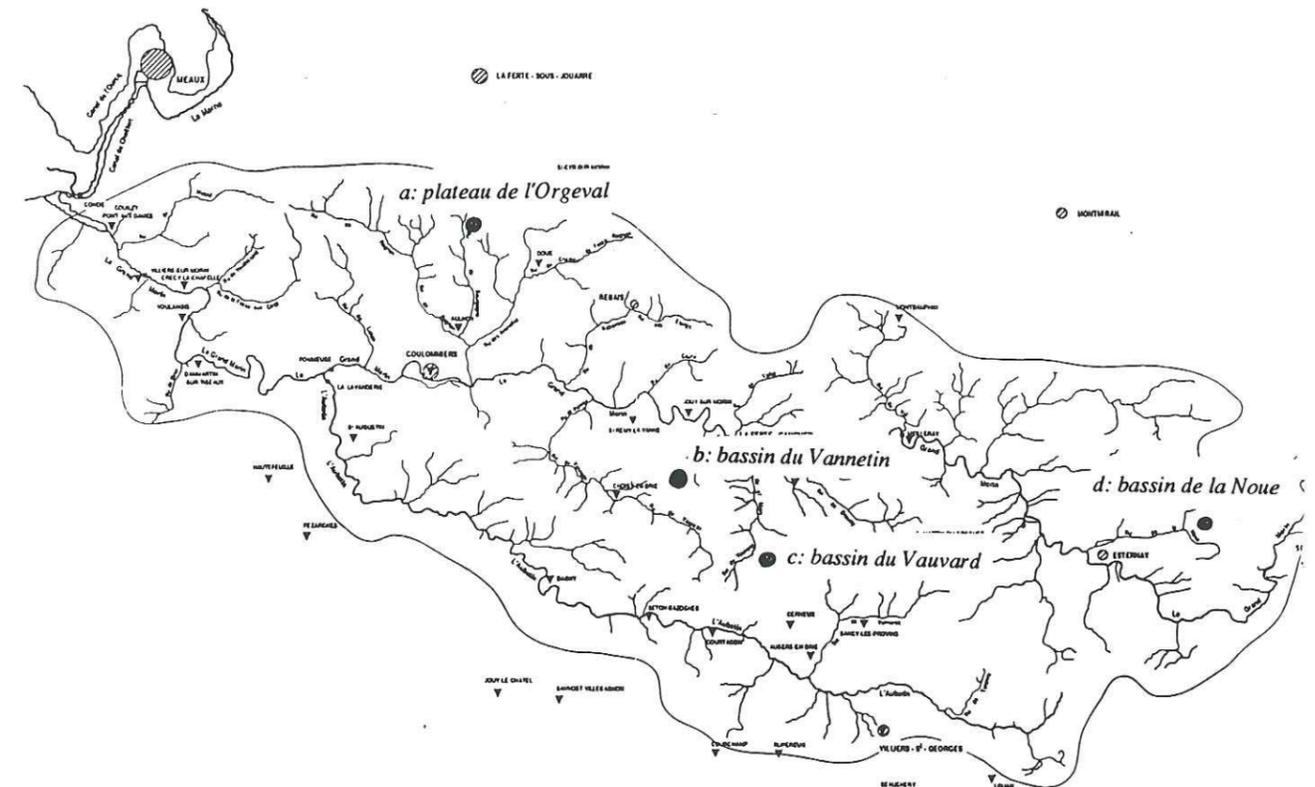


Figure II-15: Points de sondage des charges calculées

a: plateau de l'Orgeval - b: bassin du Vannetin - c: bassin du Vauvard - d: bassin de la Noue

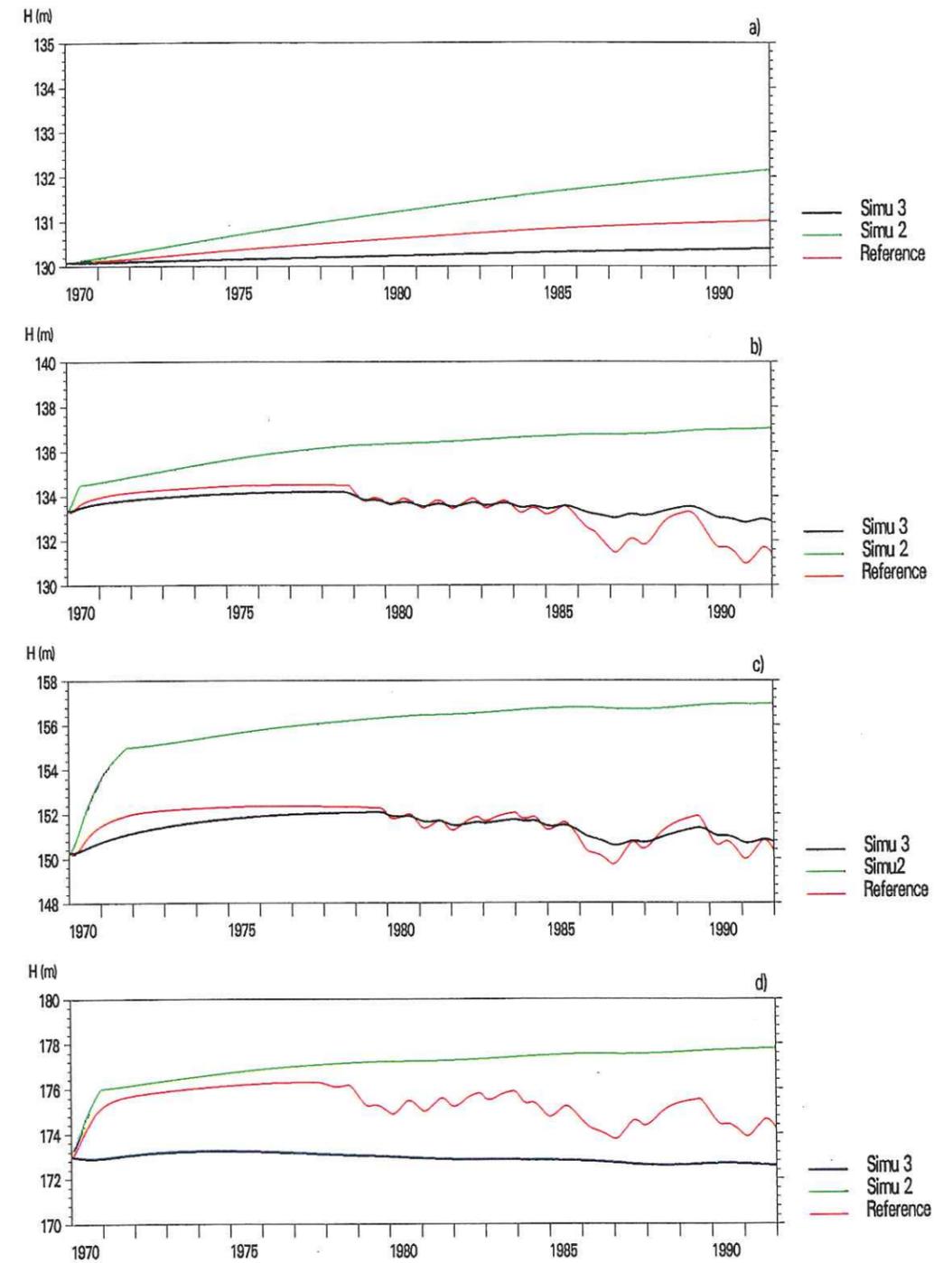


Figure II-16: Comparaison des charges calculées dans l'aquifère pour différentes simulations

a: plateau de l'Orgeval - b: bassin du Vannetin - c: bassin du Vauvard - d: bassin de la Noue

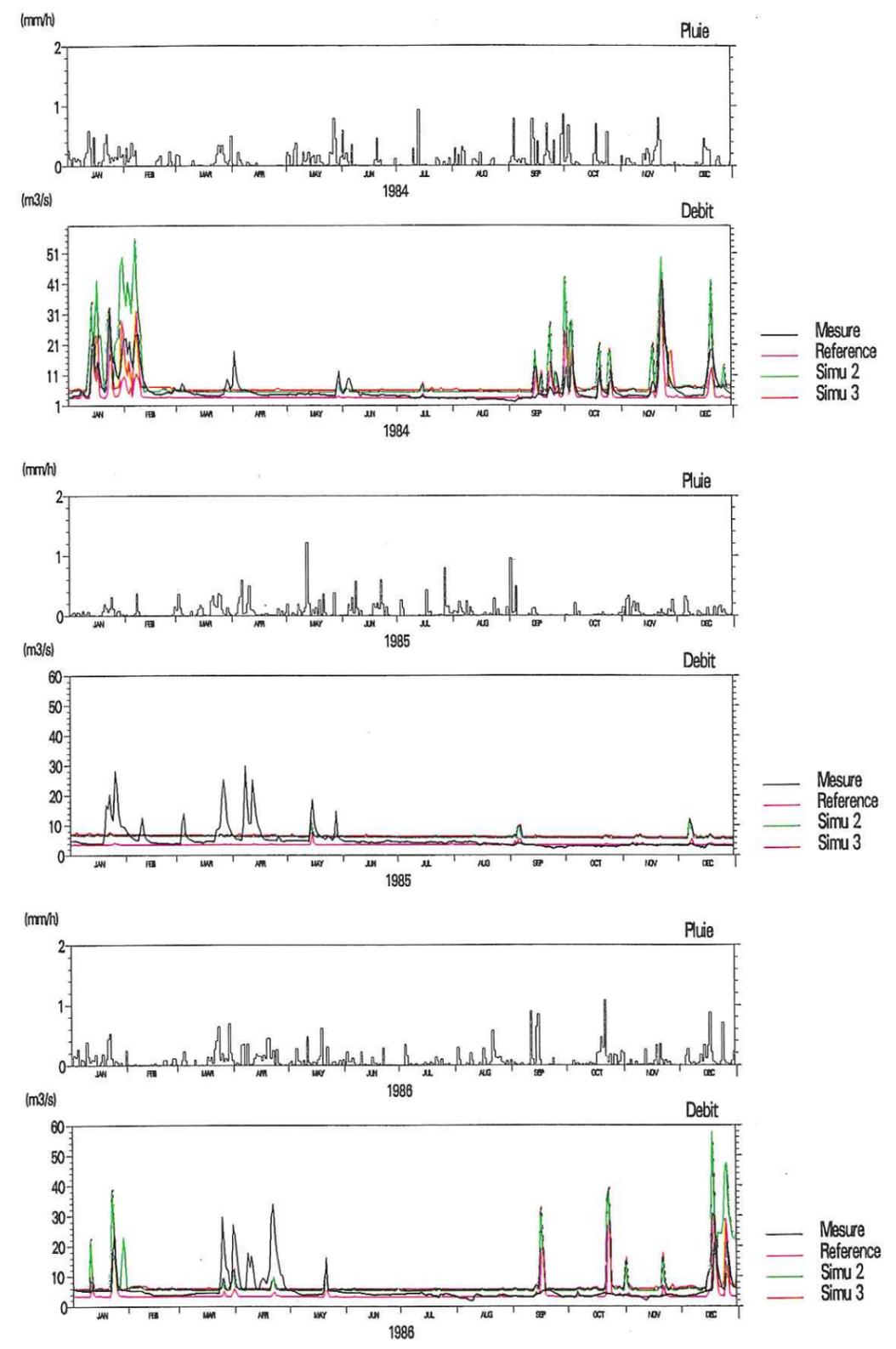


Figure II-17: Comparaison des débits calculés et observés à Pommeuse en 1986

L'annexe II (Cf. § AII-2.) expose, de manière plus détaillée, les résultats de l'analyse de validation. De cette analyse, il ressort qu'une modification des caractéristiques de l'aquifère n'a pratiquement aucune influence sur les résultats d'analyse. En effet, bien que l'erreur sur les débits soit plus importante, elle n'est pas significativement différente de celle rencontrée dans le calcul de référence. (Cf. figures AII-9 à AII-11, AII-13 et AII-15). Le caractère saisonnier du débit de base n'est toujours pas respecté et la comparaison des résidus cumulés de l'erreur de simulation montre que la contribution aux erreurs de simulation est la plus importante durant les mois d'hiver. Nous en tirons la conclusion que ces débits en rivière ne sont pas représentatifs des processus qui nous intéressent, à savoir l'hydrodynamique de l'aquifère de Champigny. Les débits en rivière ne sont donc pas un critère de validation pertinent pour un modèle de nappe comme celui du Grand Morin. On trouve ici la justification de la condition d) imposée au paragraphe II-5.1., à savoir que le critère de validation doit être sensible vis à vis et représentatif des phénomènes importants pour la modélisation.

De plus, les statistiques sur les débits en rivière (Cf. Figures AII-17 à AII-19, tableaux AII-2 à AII-4) font apparaître une nette différence entre les moyennes des débits calculés. Cette différence provient du fait que la position de la nappe est encore loin de l'équilibre, même après une période de stabilisation de plusieurs dizaines d'années. On est donc en droit de mettre en doute un réglage et une validation effectués sur la base de simulations de 1973 à 1990, alors que les temps caractéristiques de l'aquifère de Champigny sont, dans le modèle, supérieurs à 50 ans.

II-5.2.4. Limitations de la méthodologie de validation adoptée

Dans des réflexions très prospectives sur l'emploi des outils de modélisation, G. De Marsily (1994) tente d'unifier les méthodologies de validation des modèles hydrologiques, dans le cas où peu (voire aucune) de phénomènes ont été observés ou sont observables sur le site à modéliser (la modélisation entreprise ici est représentative de ce cas de figure). La démarche proposée par De Marsily est la suivante:

- dans le cas où une description statistique des paramètres du modèle est connue, ou si l'on connaît des valeurs de ces paramètres en des points bien précis, on génère (par le biais de simulations conditionnelles ou non conditionnelles, Cf. chapitre IV, § IV-1.2.2.) des réalisations de ces paramètres, lesquelles donnent naissance à autant de résultats de simulation différents. Sur ces résultats de simulation, il est alors possible d'effectuer une analyse statistique et de déduire une densité de probabilité empirique, une fonction de distribution, etc... en fonction du temps. Ce principe est celui des simulations de type Monte Carlo;

- dans une deuxième étape, on effectue la même opération sur les variables mesurées. Il faut disposer de plusieurs périodes d'observations du même phénomène (par exemple une expérience de traçage). Les statistiques sur les mesures sont alors comparées aux statistiques sur les simulations.

Dans notre cas, les phénomènes observés seraient les pluies et les débits. Cette approche n'est valable que dans la mesure où l'on dispose d'une quantité suffisante de mesures. Dans le cas qui nous occupe, il faudrait disposer de données de pluies et de débits sur plusieurs années; étant données la sensibilité du modèle aux conditions initiales et sa période de "mise en régime" (Cf. § II-5.3.1.), il serait indispensable de connaître l'état initial des aquifères au début de chaque période.

De plus, la mise en oeuvre d'une procédure de type Monte Carlo pour la simulation poserait probablement des problèmes insurmontables en termes de temps de calcul: étant donné le nombre de paramètres utilisés *et influents* dans le modèle, il faudrait générer des échantillons de taille énorme, ce qui entraînerait des temps de calcul prohibitifs (Cf. § IV-2.1.). En bref, de telles méthodologies de validation, bien que rigoureuses et souhaitables, ne nous semblent applicables que pour des modèles simples, dont le nombre de paramètres et les temps de calcul sont limités. Nous sommes conscients cependant que les méthodes que nous décrivons en annexe II pour la validation de notre modèle, sont incomplètes. Pour revenir à la définition de la validation que nous avons présentée au paragraphe II-5.1., l'adoption de la validation au sens de De Marsily (1994) revient à remettre en question le postulat b) selon lequel la variance des paramètres du modèle doit être faible.

II-5.3. Limitations de la modélisation entreprise

La modélisation du bassin versant du Grand Morin que nous avons effectuée avec MIKE SHE présente plusieurs limitations, certaines liées au manque de données et d'autres aux possibilités du modèle lui-même.

II-5.3.1. Problèmes liés au manque de données

Les données sont de deux types: structurales (*i.e.* décrivant la structure du bassin: perméabilités, porosités, etc...) et dynamiques (*i.e.* conditionnant la dynamique future du bassin simulé: charges initiales dans les aquifères, teneurs en eau initiales dans les sols).

Données structurales

- La structure géologique du bassin du Grand Morin est complexe. En particulier, l'aquifère dit des calcaires de Champigny est formé de plusieurs horizons différents (calcaires de Champigny et de Saint-Ouen, séparés par des couches marneuses), non

homogènes. Bien que MIKE SHE soit adapté à la prise en compte des aquifères multicouches, le manque de données hydrodynamiques nous a amené à représenter une géologie complexe sous une forme relativement simplifiée, en faisant appel à une hypothèse d'homogénéité sur des structures dont nous savons qu'elles sont fortement hétérogènes.

Ce problème n'est pas limité à la modélisation du bassin du Grand Morin: il est rencontré très souvent dans le domaine de la modélisation des écoulements souterrains.

Le réglage du modèle pourrait être affiné par le suivi piézométrique des aquifères. En particulier, il serait utile de disposer de mesures de gradients piézométriques, afin de déterminer les tendances générales du champ des vitesses dans l'aquifère, ainsi que son évolution ou sa stabilité dans le temps.

La connaissance des pluies à un pas de temps journalier a sans doute conduit, dans certains cas au moins, à sous-estimer les quantités de pluie. En été en particulier, il est probable que les pluies ont lieu sur une période de quelques heures seulement, donc avec une intensité plus grande que celles qui ont été fournies au modèle. Dans la réalité, il est possible que le ruissellement Hortonien soit bien plus important que celui calculé.

Sensibilité aux conditions initiales - échelles de temps

Une donnée nécessaire aux simulations MIKE SHE est la distribution initiale des charges hydrauliques dans la zone saturée. Si les temps caractéristiques de la dynamique de nappe sont très supérieurs à la durée de simulation, les résultats de simulation vont être très dépendants de cette condition initiale. Afin d'évaluer cette dépendance, nous avons effectué deux simulations, sur la période de 1970 à 1991. La première simulation prenait pour condition initiale, dans chaque couche de l'aquifère, la charge obtenue après stabilisation sous une recharge en régime permanent de 720 mm/an. La seconde simulation (dénommée "reprise") prenait comme état initial les charges obtenues à la fin de la première. En différents points du modèle (figure II-15), nous avons comparé les charges simulées au cours des périodes 1970-1991 (figure II-18).

Si, en certains points du bassin, la convergence des charges calculées peut être observée (par exemple au niveau du bassin du Vannetin, figures II-18.c et d), il n'en est pas de même en tous les points du bassin. En particulier, au centre du bassin, on constate une divergence progressive des charges simulées (figure II-18.b). Il est visible (Cf. figure II-18.a) également que les charges au niveau du bassin de l'Orgeval sont encore loin de la convergence.

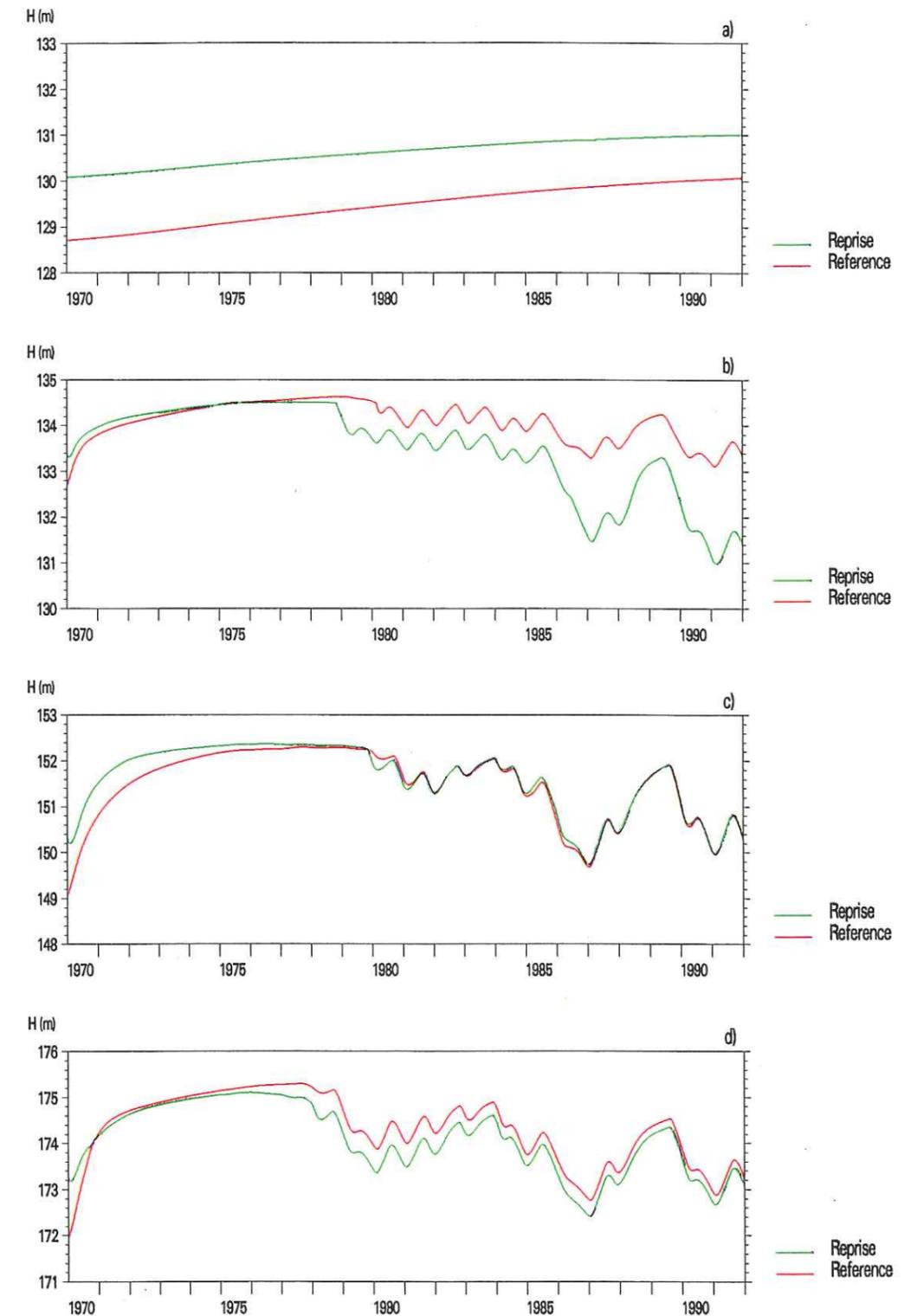


Figure II-18: évolution des charges calculées au niveau des points de sondage pour la simulation de référence et la reprise

a: plateau de l'Orgeval - b: bassin du Vannetin - c: bassin du Vauvard - d: bassin de la Noue

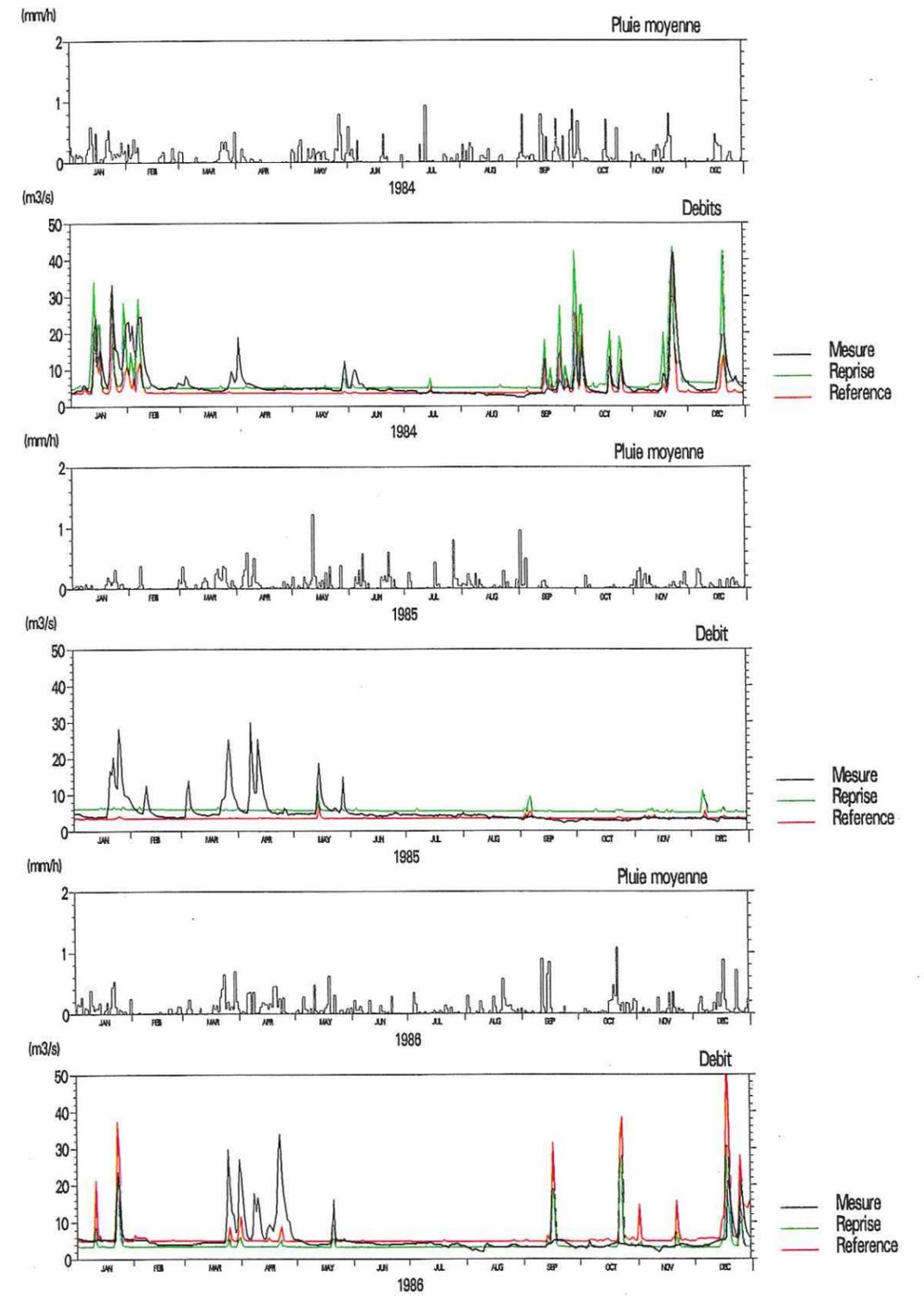


Figure II-19: comparaison des débits mesuré et simulé pour la simulation de référence et la reprise

On observe également une modification des débits simulés en rivière. La comparaison sur plusieurs années des débits simulés (Cf. figure II-19) et observés montre qu'en règle générale, la qualité de la prévision des débits est meilleure dans les périodes de l'année où elle était déjà bonne (janvier et février 1984), mais qu'elle ne subit pas d'amélioration sensible dans celles où elle était mauvaise (exemple: année 1985). Ceci se traduit au niveau de l'écart-type des débits, par un meilleur ajustement entre mesure et calcul (comparer les tableaux AII-2 et AII-5).

On notera de plus que la modélisation ne reproduit toujours pas les variations saisonnières du débit (Cf. figures AII-8, AII-12, AII-16 et AII-20) et que le coefficient d'efficacité (ou critère de NASH) est inférieur à celui de la simulation de référence.

Le fait que les charges calculées continuent de diverger prouve que le modèle (sinon le bassin réel lui-même) possède une "mémoire" importante et que la durée de la simulation est trop courte pour que la méconnaissance des conditions initiales dans l'aquifère de Champigny soit sans effet. La validation ne peut être effectuée, car nos modélisations ne satisfont pas le critère e), énoncé au paragraphe II-5.1, selon lequel les échelles de temps permettant la validation du modèle doivent être compatibles avec celle de la simulation.

II-5.3.2. Limitations du modèle

Bien que MIKE SHE simule de manière assez complète la partie continentale du cycle hydrologique, des choix de modélisation ont été effectués, qui rendent difficile son application au bassin versant du Grand Morin:

- Mégnien (1979), SOGREAH (1961) mentionnent un phénomène de noyage et d'imbibition des limons des plateaux, qui entraîne un ruissellement important durant les mois d'hiver. En particulier, la formation de nappes perchées ne peut être modélisée par MIKE SHE, qui considère un écoulement uniquement vertical dans la zone non saturée, sans échange possible entre les colonnes de sol.
- Mégnien mentionne également un phénomène de fissuration par dessèchement des limons en été, ce qui accroît les possibilités d'infiltration des précipitations, alors que durant l'hiver, le gonflement de ces mêmes limons rend très difficile l'infiltration de l'eau. Ce comportement se traduit par un comportement hystérétique des sols. Le modéliser impliquerait de prendre en compte des caractéristiques de sols variables en fonction du temps. Cette approche nous amène à remettre en question le point a) du paragraphe II-5.1.: Il est probable également que la modélisation de l'infiltration par la loi de

Richards soit inadaptée à ce type de sols, en particulier en été, lorsque les limons sont largement fissurés. Ce comportement particulier peut expliquer l'absence de ruissellement lors des pluies à certaines périodes de l'année, et son abondance à la fin des périodes hivernales.

- L'étroitesse de la vallée du Grand Morin (200 m environ) rend impossible sa description par un maillage de 1 km de côté: dans le modèle MIKE SHE, les points voisins des tronçons fluviaux qui représentent le Grand Morin sont donc à la même altitude que les plateaux. Une telle configuration rend impossible l'apparition d'un ruissellement de Dunne par remontée de la nappe au fond des vallées, alors que ce phénomène se produit dans la réalité. On peut trouver ici une explication au mauvais comportement du modèle dans les périodes hivernales.
- La formulation du type "milieu continu" adoptée dans MIKE SHE est impuissante à traduire certains phénomènes de transfert hydrique (en particulier les écoulements préférentiels en direction de la nappe, et qui peuvent se traduire par des pics de recharge au moment d'épisodes de pluie).

En nous appuyant sur notre expérience de la modélisation hydrologique à l'aide du modèle MIKE SHE, ainsi que sur les considérations émises par Kauark-Leite (1990) et De Marsily (1994), nous sommes en mesure de proposer une définition plus large de la validité d'un modèle. Les caractéristiques d'un modèle validé nous semblent être les suivantes:

- a) les paramètres d'un modèle validé obéissent à une loi d'évolution dans le temps connue;
- b) dans le cas où ils sont fortement variables dans l'espace, ces paramètres peuvent être décrits de façon satisfaisante par leurs propriétés statistiques (Cf. chapitre IV): loi de distribution et structure spatiale;
- c) les écarts résiduels entre variables observées et simulées doivent être faibles devant la variance des variables observées et ne doivent pas résulter d'un processus non aléatoire;
- d) le critère de validation doit être représentatif des - et sensible aux - phénomènes importants pour la modélisation.
- e) la modélisation doit être compatible avec les échelles de temps caractéristiques du modèle et des processus naturels.

On regroupe, sous le vocable de phénomènes importants pour la modélisation, les deux classes de phénomènes suivantes:

- les phénomènes qui influent, lors de la modélisation, de manière significative sur la variable examinée;
- les phénomènes dont la représentation correcte est indispensable pour obtenir des variations correctes de la variable examinée.

II-6. CONCLUSIONS

Nous avons décrit dans ce chapitre une méthodologie de réglage d'un modèle MIKE SHE appliqué à deux bassins versants de tailles différentes et examiné sa validité pour l'un d'entre eux.

En raison de la quantité de données nécessaires à la mise en oeuvre et au réglage du modèle, on a été amené à estimer un certain nombre de paramètres manquants, par des méthodes décrites dans ce chapitre.

La modélisation des bassins du Grand Morin et du Vannetin se heurte à plusieurs problèmes: le manque de données, la complexité géologique du site (aquifère de Champigny multicouches, présence de karst en certains endroits) et celle des phénomènes hydrauliques mis en jeu. Le réglage et la validation se heurtent au problème de la pertinence des critères adoptés: on ne dispose que d'éléments restreints (débits en rivière, carte piézométrique à un instant donné), qui ne sont pas représentatifs des phénomènes que l'on souhaite modéliser (des écoulements transitoires en aquifère). Le modèle, bien que très complet dans sa description des phénomènes hydrologiques, ne peut cependant pas simuler toutes les configurations hydrauliques particulières au Grand Morin (recharge de nappe à travers des discontinuités de couverture, comportement hydraulique des sols variable avec les saisons, présence des nappes perchées et ruissellement sub-superficiel). Nous avons vu également que des éléments de réglage significatifs dans un cas de figure (débits en rivière pour le bassin du Grand Morin) peuvent ne plus l'être dans d'autres (bassin du Vannetin).

L'expérience acquise lors de la modélisation hydrologique, ainsi que l'apport de réflexions théoriques (Kauark-Leite, 1990; De Marsily, 1994) nous met en mesure d'étendre la notion de validité d'un modèle hydrologique.

Nous avons vu également que la reconnaissance de terrain - parfois négligée par les modélisateurs - peut et doit être considérée comme un élément indispensable de la collecte de données, en ce sens qu'elle permet de se faire une idée du comportement dynamique du site modélisé.

Nous rappellerons enfin que MIKE SHE est un produit jeune, dont les applications en France sont à l'heure actuelle peu nombreuses: bien que la modélisation des bassins du Grand Morin et de l'Aubetin soit un pas significatif dans son apprentissage, d'autres expériences de modélisation doivent être effectuées, sur d'autres sites, pour pouvoir cerner davantage ses capacités et ses limitations.

III - DETERMINATION DE LA PRESSION DE POLLUTION ADMISSIBLE : METHODOLOGIE PROPOSEE

Résumé

On propose dans ce chapitre une méthodologie de détermination de la pression de pollution admissible, fondée notamment sur un calcul inverse du transport dans l'aquifère. Une procédure particulière doit être adoptée dans le cas des parcelles drainées. Cette approche demandant une grande puissance de calcul, on dégage un corpus de simplifications pour la modélisation du transport dans la zone non saturée. On légitime notamment l'emploi de l'indice AF, dont on introduit une version modifiée.

L'application de la méthodologie à un site-test permet de confirmer la grande sensibilité des résultats aux caractéristiques du sol et justifie l'analyse de la variabilité spatiale entreprise au chapitre IV.

III-1. RAPPELS : OBJECTIFS

Le but ultime des travaux présentés ici est de fournir aux décideurs et aux exploitants agricoles des indications concrètes sur la manière d'employer les produits phytosanitaires, dans une optique de préservation de la ressource en eau. Nous présentons dans ce chapitre une méthodologie permettant de cartographier la pression de pollution admissible au voisinage des puits de pompage en aquifère.

Avant de rencontrer un captage, les produits phytosanitaires peuvent être transportés sur des distances de l'ordre de plusieurs kilomètres. A de telles échelles d'espace, un captage devient assimilable à un point. En réalité, il existe une zone dite d'influence de ce captage, qui est la zone de l'aquifère dans laquelle l'eau est susceptible d'être pompée par le captage. Par abus de langage, lorsque nous emploierons le terme de captage, c'est en fait à sa zone d'influence que nous nous référerons.

Précisons que la méthodologie que nous proposons est destinée à être appliquée sur des superficies allant jusqu'à plusieurs kilomètres carrés; la représentation de telles étendues dans une modélisation distribuée telle que définie précédemment impose une discrétisation relativement grossière (les tailles de maille seront de l'ordre de la centaine de mètres) et amène à formuler des hypothèses - pas forcément justifiées - sur l'homogénéité des caractéristiques du sol à de telles échelles. Dans ce chapitre, nous supposerons vérifiée l'hypothèse de l'homogénéité sur les mailles de calcul des paramètres de l'hydrodynamique et

du transport. La question de la variabilité spatiale et de l'incertitude sur les caractéristiques de sol sera abordée au chapitre V.

III-2. PRATIQUES ACTUELLES DE PROTECTION DES CAPTAGES

A l'heure actuelle, des règles pour la protection des captages existent dans de nombreux pays. On a généralement recours à la notion de périmètre de protection. Pour un captage donné, il existe différents niveaux de protection, auxquels on associe différents périmètres. En pratique, la majorité des pays où existe une politique de protection de la ressource en eau souterraine distinguent trois périmètres (Lobo-Ferreira, 1993):

- Le périmètre de protection immédiate: ce périmètre n'est le siège d'aucune activité autre que celles relatives à l'exploitation et à l'entretien des installations. En règle générale, ce périmètre s'étend sur une dizaine de mètres autour du captage (30 mètres pour les États-Unis).
- Le périmètre de protection rapprochée, ou périmètre intérieur: il marque la zone à l'extérieur de laquelle les organismes pathogènes éventuels ne doivent représenter aucun danger de contamination pour le captage. En Allemagne, cette zone est délimitée de manière à ce que la durée de transfert entre sa frontière et le puits soit au moins égale à 50 jours. En Grande-Bretagne, les durées de transfert recommandées varient entre 50 et 400 jours suivant la région. Les États-Unis prennent comme base une durée de 30 jours, la Suisse se limite à 10 jours.
- Le périmètre de protection éloignée, ou périmètre extérieur: à l'intérieur de ce périmètre, on pourra autoriser une activité d'origine agricole, à condition qu'elle soit réglementée. Ainsi, les apports en produits phytosanitaires ne pourront pas dépasser certaines valeurs bien définies. Aux États-Unis ce périmètre est associé à une durée de trajet de 210 jours.

En France, il n'existe pas de réglementation uniforme pour la définition des périmètres de protection: les critères sont fixés au niveau de chaque département et les périmètres sont déterminés au coup par coup par des hydrogéologues agréés.

III-3. METHODOLOGIE PROPOSEE

La méthodologie que nous proposons a pour objet de quantifier, en tout point du bassin agricole étudié, les quantités d'épandage en produits phytosanitaires à ne pas dépasser pour garantir la qualité de la ressource en eau. Elle s'inscrit, d'après le paragraphe précédent, dans le cadre de la définition d'un périmètre de protection éloignée.

III-3.1. Hypothèses de base - principe général

Nous ferons, dans la suite de ce chapitre, les hypothèses suivantes:

- (1) Les aquifères où ont lieu les pompages ayant généralement une épaisseur importante, et étant situés à de grandes profondeurs, on fait l'hypothèse que la recharge fluctue très peu et que le régime des vitesses y est donc permanent. Cette hypothèse devra être vérifiée avant toute application de la méthodologie à un site réel.
- (2) En raison des grandes distances couvertes par les produits phytosanitaires dans les aquifères, on suppose que la diffusion transversale a pour effet d'homogénéiser le profil des concentrations sur la verticale. Le transport des produits dans l'aquifère peut alors être considéré comme bidirectionnel horizontal. Cette hypothèse se justifie comme suit: pour couvrir une distance horizontale l_h donnée, un nuage de produit phytosanitaire, initialement concentré dans la partie supérieure de la nappe, mettra une durée t , donnée par la formule :

$$t = \frac{l_h}{V_i} R \quad (III.1)$$

où V_i est la vitesse interstitielle de l'eau dans la nappe et R le facteur retard du produit.

D'autre part, la dimension verticale du nuage est donnée par:

$$l_v = \sqrt{2 \frac{\eta D t}{R}} \quad (III.2)$$

où D est la diffusivité, donnée par:

$$D = \alpha_T V_i \quad (III.3)$$

où α_T est la dispersivité transversale dans la direction verticale et η la porosité de l'aquifère. En introduisant (III.1) et (III.3) dans (III.2), on obtient :

$$l_v = \sqrt{2 \alpha_T \eta l_h} \quad (III.4)$$

Par exemple, pour un aquifère d'épaisseur caractéristique 10 m, où la dispersivité α_T est de l'ordre du mètre, en prenant une porosité η de l'ordre de 0,1, on trouve que la distance nécessaire à l'étalement du nuage de produit sur toute la hauteur de l'aquifère

est de l'ordre de la centaine de mètres. Lorsque l'on traite des trajets de plusieurs kilomètres, on peut donc raisonnablement faire l'hypothèse que le profil de concentration a eu le temps de s'homogénéiser sur la verticale.

La problématique est la suivante : connaissant C_0 , concentration maximale en produit phytosanitaire tolérée au captage, il s'agit de déterminer, à la surface du sol, le champ $Q_p(x,y)$ des taux d'épandage qu'il est possible d'appliquer à la surface du sol sans entraîner un dépassement de la concentration C_0 au niveau du captage. Le champ $Q_p(x,y)$ sera désigné par la suite sous le nom de *pression de pollution admissible*. Il s'exprime en unité de masse de produit par unité de surface de sol.

La méthodologie proposée pour déterminer ce champ de pression de pollution admissible est calquée sur la succession des processus qui déterminent le devenir des produits phytosanitaires :

- En s'infiltrant dans la zone non saturée, les produits phytosanitaires sont transportés dans la zone non saturée en direction de l'aquifère. Ils arrivent au niveau du toit de la nappe à une concentration de recharge donnée, fonction de la pression de pollution appliquée en surface.
- Après leur recharge dans la nappe, ils sont transportés dans l'aquifère, où ils sont susceptibles de contaminer un captage, même situé très loin du point d'épandage.

Dans un premier temps, connaissant la concentration admissible au niveau du captage, on déterminera le champ de concentration admissible dans l'aquifère. On démontre dans le § 2.2. que ce champ de concentration peut être obtenu par un simple calcul inverse du transport dans la zone saturée. On déduit de ce champ de concentration la pression de pollution admissible à la surface du sol en utilisant la relation qui lie la pression de pollution à la concentration de recharge de l'aquifère. Ce point fait l'objet des paragraphes 2.3 et 2.4, qui exposent comment est établie cette relation dans les cas d'une zone non saturée "classique", où les écoulements et le transport peuvent être considérés comme verticaux, et dans le cas des parcelles drainées, où ils sont plus complexes.

Le problème des parcelles drainées est le suivant: au contraire d'une zone saturée conventionnelle, la raison d'être d'une zone drainée est la présence d'un horizon saturé, rabattu par le réseau de drainage; dans cet horizon, l'écoulement est quasi horizontal (figure III-1). De plus, au contact avec la zone non saturée existe une frange capillaire où l'écoulement est fortement oblique. Enfin, l'échelle spatiale caractéristique des écoulements dans un réseau

de drainage est celui de l'espacement entre les drains, soit la dizaine de mètres (Roe et Ayres, 1954). Non seulement la modélisation unidirectionnelle verticale ne peut plus être justifiée dans ce cas, mais l'échelle caractéristique de l'écoulement rend impossible sa représentation sur un maillage de la taille d'une centaine de mètres. La démarche adoptée consiste à modéliser l'écoulement et le transport des produits phytosanitaires dans les parcelles drainées sur des modèles à petite échelle, et d'en déduire une fonction de transfert globale entre quantité d'épandages en surface et concentration de recharge dans la nappe.

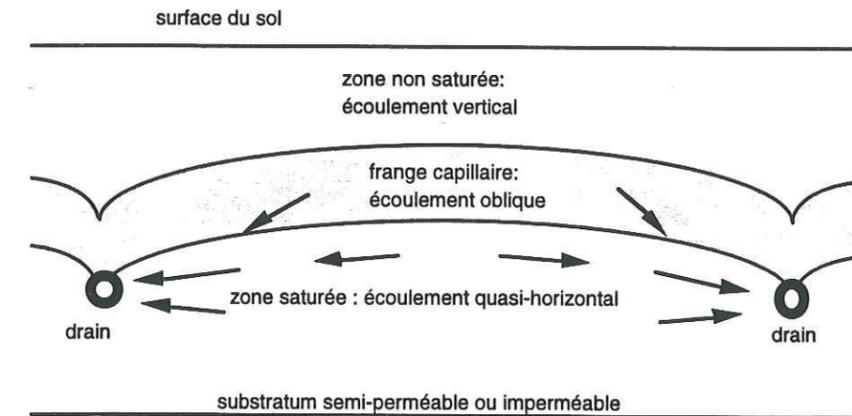


figure III.1 : configuration typique de l'écoulement dans une parcelle drainée

III-3.2. Détermination de la concentration admissible dans l'aquifère

Principe mathématique

Rappelons l'équation du transport de soluté en présence de dégradation (Cf. § I-3.1.):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\theta_s R C) = \text{Div} (-V_d C + \theta_s D \text{Grad} C) - \lambda \theta_s C + Q_{\text{apport}} \quad (\text{III.5})$$

Cependant, le fait de traiter un problème inverse de transport nous conduit à éliminer le terme de diffusion dans l'équation du transport: la présence de ce terme conduit en effet à des problèmes dits "mal posés" au sens mathématique (Yeh [1986, 1987]; Yeh and Sun, 1987).

L'équation du transport devient:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\theta_s R C) = -\text{Div} (V_d C) - \lambda \theta_s C + Q_{\text{apport}} \quad (\text{III.6})$$

L'hypothèse (1) du paragraphe précédent, jointe à celle du régime de transport permanent, permet de négliger le terme transitoire dans cette équation:

$$\text{Div} (V_d C) = -\lambda \theta_s C + Q_{\text{apport}} \quad (\text{III.7})$$

En intégrant (III.7) sur la verticale, en faisant appel à l'hypothèse (2) d'homogénéité verticale de la concentration en produit phytosanitaire, et en supposant que θ_s est égale à la porosité η de l'aquifère, on obtient:

$$h \cdot \text{Div} (V_d C) = -\lambda \eta h C + h \cdot Q_{\text{apport}} \quad (\text{III.8})$$

Le terme $h.Q_{\text{apport}}$ désigne le débit d'apport en produit phytosanitaire par unité de surface horizontale. Il représente la quantité de produit phytosanitaire apporté par l'eau de recharge de la nappe:

$$h.Q_{\text{apport}} = Q.C_p \quad (\text{III.9})$$

Où Q (m.s^{-1}) est la recharge hydraulique de la nappe et C_p (g.l^{-1}) la concentration de produit phytosanitaire dans l'eau de recharge de la nappe. L'équation (III.8) devient donc:

$$\text{Div}(h V_d C) = Q C_r - \lambda \eta h C \quad (\text{III.10})$$

Le champ de concentration admissible dans l'aquifère C_a vérifie l'équation (III.10), avec de plus les conditions suivantes:

$$C_a(x_0, y_0) = C_0 \quad (\text{III.11.a})$$

$$C_a(x, y) = C_0(x, y) \quad (\text{III.11.b})$$

Par définition même du champ de concentration admissible, la condition (III.11.a) est immédiate, (x_0, y_0) étant les coordonnées du captage. La condition (III.11.b) provient du fait que l'on suppose avoir épandu en surface le produit au taux de pression de pollution admissible, qui ne doit pas entraîner, au niveau de la nappe, le dépassement de la concentration admissible en aquifère.

L'équation du transport peut s'écrire:

$$\text{Div}(h V_d C_a) = Q C_a - \lambda \eta h C_a \quad (\text{III.12})$$

$$\text{Div}(h V_d) C_a + h V_d \text{Grad}(C_a) = Q C_a - \lambda \eta h C_a \quad (\text{III.13})$$

En régime permanent, la recharge Q étant par définition égale à la divergence des débits unitaires ($h V_d$), on obtient:

$$V_d \text{Grad}(C_a) = -\lambda \eta C_a \quad (\text{III.14})$$

D'après l'hypothèse de régime permanent dans l'aquifère, il est possible de définir des lignes de courant, le long desquelles l'équation (III.14) s'exprime:

$$\frac{dC_a}{dt} = -\lambda C_a \quad (\text{III.15.a})$$

le long des trajectoires où la coordonnée de temps t et les coordonnées d'espace (x, y) sont liées par la relation:

$$\left(\frac{dx}{dt} \right) = \frac{V_d}{\eta} = V_i \quad (\text{III.15.b})$$

De telles trajectoires sont encore appelées courbes caractéristiques. La solution de (III.15) est de la forme:

$$C_a(x, y) = C_0 \cdot e^{-\lambda t(x, y)} \quad (\text{III.16})$$

où $t(x, y)$ est la durée de transfert de l'eau entre le captage et le point de coordonnées (x, y) , selon la vitesse V_i . On introduit par commodité la durée de transfert convectif $t_C(x, y)$, de

signe opposé à $t(x, y)$: $t_C(x, y)$ est alors positif si le point (x, y) est en amont du captage. On a alors:

$$C_a(x, y) = C_0 \cdot e^{\lambda t_C(x, y)} \quad (\text{III.17})$$

Nous avons choisi, pour calculer le champ de concentration admissible, d'effectuer un calcul inverse du transport des produits phytosanitaires dans l'aquifère: d'après la formule (III.17), le champ C_a peut être obtenu par un calcul de transport en régime hydraulique permanent, en imposant la concentration C_0 au point (x_0, y_0) et en inversant les signes du champ des vitesses V_i et du taux de dégradation λ dans l'aquifère.

III-3.3. Détermination de la pression de pollution admissible dans le cas de transferts verticaux dans la zone non saturée

Nous nous plaçons ici dans le cas où l'homogénéité dans le plan horizontal des caractéristiques du sol est suffisante pour que l'on puisse faire l'approximation de transferts unidirectionnels verticaux de l'eau et des produits phytosanitaires. Nous supposons que la concentration admissible dans l'aquifère a déjà été déterminée, suivant la méthode du § 2.2.

Dans une colonne de sol s'étendant du substratum de la nappe jusqu'à la surface du sol (figure III-2), l'équation du transport s'écrira, en tenant compte de la dégradation:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta R C) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \cdot C - \alpha_L |v_d| \frac{\partial C}{\partial z} \right) = -\lambda \theta C + Q_{\text{apport}} \quad (\text{III.18})$$

z étant la cote, orientée positivement vers le haut, θ la teneur en eau, R le facteur retard, C la concentration en produit, v_d la vitesse de Darcy, α_L la dispersivité longitudinale, Q_{apport} le terme source volumique (e.g. prélèvement racinaire), λ le taux de dégradation du produit.

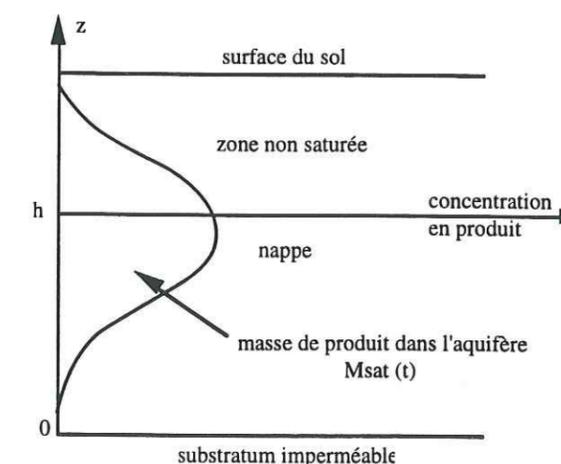


Figure III.2 : cas des transferts verticaux dans la zone non saturée

On suppose qu'une fois épandu à la surface du sol en quantité Q_p , le produit phytosanitaire est incorporé dans le sol par dissolution dans les eaux d'infiltration, à sa limite de solubilité C_s . La condition en concentration à la limite supérieure de la colonne de sol est alors:

$$C(z_{surface}, t) = C_s \text{ si } t \in [t_1, t_2] \quad (III.19.a)$$

$$C(z_{surface}, t) = 0 \text{ sinon} \quad (III.19.b)$$

t_1 étant la date d'épandage et t_2 celle à laquelle toute la quantité de produit épandue aura été entraînée dans le sol. t_2 est donné par:

$$\int_{t_1}^{t_2} P(t) dt = \frac{Q_p}{C_s} \quad (III.20)$$

où P ($m.s^{-1}$) est l'intensité de la pluie.

En prenant pour origine des cotes le substratum de l'aquifère, la masse de produit $M_{sat}(t)$ ($kg.m^{-2}$) contenue par unité de surface dans la phase liquide de la zone saturée à la date t est donnée par:

$$M_{sat}(t) = \int_0^h \eta C(z, t) dz \quad (III.21)$$

Le maximum M_{max} ($kg.m^{-2}$) de M_{sat} par rapport au temps représente le maximum du potentiel de contamination de la nappe par la recharge du produit phytosanitaire. La pression de pollution admissible Q_p ($kg.m^{-2}$) est la pression de pollution pour laquelle on a:

$$M_{max}(Q_p) = R h \eta C_a \quad (III.22)$$

où C_a est la concentration admissible dans la nappe au point considéré. La valeur de Q_p satisfaisant (III.22) sera déterminée par approximations successives, en imposant différentes valeurs de Q_p et en calculant la valeur de M_{max} qui lui est associée.

III-3.4. Détermination de la pression de pollution admissible dans le cas de parcelles drainées

Nous avons justifié au § 2.1. la nécessité d'une procédure spécifique aux parcelles drainées pour déterminer la fonction de transfert liant la pression de pollution en surface au maximum de la concentration de recharge dans l'aquifère.

La configuration hydraulique propre au phénomène de drainage exclut la modélisation unidirectionnelle. Toutefois, les longueurs des drains dans les parcelles agricoles sont souvent d'un ordre de grandeur supérieures à leur espacement (la centaine de mètres contre la dizaine respectivement, Roe & Ayres, 1954). On peut donc faire raisonnablement l'approximation que les transferts d'eau et de soluté ont lieu dans un plan orthogonal à la

direction des drains. De plus, les espacements entre drains étant généralement constants dans un sol homogène, le problème peut être considéré comme périodique et symétrique en espace.

Deux configurations peuvent apparaître:

- Soit l'aquifère dans lequel a lieu le pompage est l'aquifère drainé. Peu probable (un aquifère est généralement drainé parce que de transmissivité faible), cette hypothèse amène au raisonnement suivant: les écoulements et les transferts dans la zone saturée de parcelles drainées sont très lents, et globalement orientés vers les drains. Les produits phytosanitaires vont donc y être, soit dégradés sur place, soit captés par le réseau de drainage et être évacués par le réseau hydrographique. Une étude réalisée par l'auteur au LHF a permis de confirmer cette hypothèse (LHF, 1993). Du fait de l'impossibilité de contaminer un captage dans un tel aquifère, la pression de pollution admissible sera très élevée.
- Soit l'aquifère n'est pas celui dans lequel a lieu le pompage: l'aquifère vulnérable est alors situé sous l'aquifère drainé, séparé de celui-ci par une couche semi-perméable à travers laquelle a lieu l'infiltration de l'eau et des produits phytosanitaires (figure III.3). Dans ce cas de figure, on effectuera une modélisation du transport du produit phytosanitaire concerné sur un domaine comprenant l'aquifère inférieur, la couche peu perméable et l'aquifère drainé.

Dans ce dernier cas, l'équation du transport s'écrit:

$$\frac{\partial}{\partial t}(R \theta C) + \text{Div}(V_d C) = Q C r - \lambda \eta h C \quad (III.23)$$

La condition à la limite supérieure du domaine étudié (surface du sol) est identique à celle donnée par les équations (III.14.b-c). On considère que l'espacement des drains est constant: le problème est alors périodique et, en l'absence de pente importante de la topographie ou du substratum de la nappe, il est également symétrique. L'étude peut alors s'effectuer sur un domaine dont l'étendue verticale est un demi-espace entre drains (Cf. figure III.3). L'évolution en fonction du temps de la masse de produit phytosanitaire contenu dans l'aquifère inférieur est donnée par:

$$M_{sat}(t) = \int_0^h \int_0^{d_d/2} \eta C(x, z, t) dx dz \quad (III.24)$$

Où d_{dr} (m) est la dimension horizontale entre drains. De la même manière qu'au paragraphe précédent, on recherche le maximum M_{max} dans le temps de M_{sat} et on ajustera Q_p de façon à respecter l'égalité:

$$M_{max} = \eta h \frac{d_{dr}}{2} C_a \quad (III.25)$$

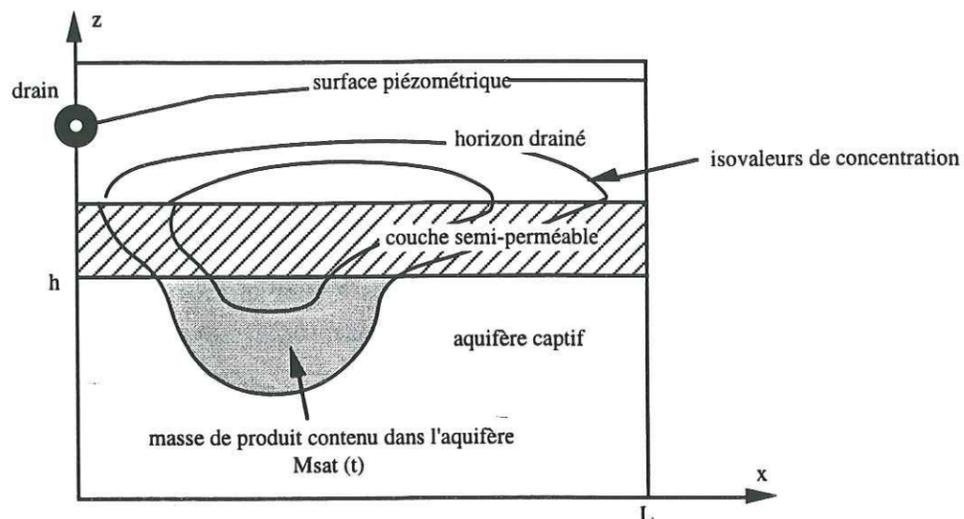


Figure III.3 : cas des transferts dans les parcelles drainées

III.4. CONTEXTE DE SIMPLIFICATION DES CALCULS DANS LA ZONE NON SATURÉE

III.4.1. Objectifs

La méthodologie proposée implique la modélisation du transport de soluté dans la zone non saturée, afin de déterminer, par approximations successives, la pression de pollution admissible qui correspond à une concentration admissible dans la nappe en un point donné. Ces opérations doivent être répétées en tout point de la zone à laquelle on s'intéresse, ce qui peut entraîner des temps et des coûts de calcul très importants. Il est donc indispensable d'étudier dans quelle mesure la fonction de transfert entre la surface du sol et le toit de la nappe peut être simplifiée, afin d'épargner de nombreux calculs pour une application pratique.

Cette fonction de transfert dépend de la nature du sol (caractéristiques hydrodynamiques, physico-chimiques), de la végétation, du produit considéré, des conditions météorologiques (précipitations) et de la distance surface-nappe. En d'autres termes, on applique un principe de classification à la zone non saturée, en faisant l'hypothèse de similitude de comportement du produit phytosanitaire dans chaque classe de sol. On pourrait réduire le nombre de simulations du transport dans la zone non saturée en effectuant une seule simulation de transport par type de sol et de végétation donnés; connaissant la fonction de transfert entre surface du sol et toit de la nappe pour une profondeur de nappe donnée, il serait possible d'en

déduire la fonction de transfert pour tous les points où la distance surface-nappe est différente, mais où le sol et la végétation sont identiques.

III.4.2. Approche théorique

Supposons que pour une classe constituée par une végétation, un sol donné et pour une distance surface-nappe L particulière, la fonction de transfert entre surface du sol et nappe soit connue.

L'équation différentielle qui régit l'évolution de la masse de produit dans la nappe est la suivante:

$$\frac{dM_{sat}}{dt} = F_{sat}(L,t) - \lambda_s M_{sat} \quad (III.26)$$

F_{sat} étant le flux de produit qui parvient à la nappe et λ_s (s^{-1}) étant le taux de dégradation du produit dans cette nappe. Lorsque la distance surface-nappe est suffisamment grande, on peut considérer que le régime hydrodynamique est permanent dans la plus grande partie de la zone non saturée. Les flux en eau et en produit phytosanitaire sont alors indépendants du temps et on a:

$$F_{sat} = Q \cdot C(L) \quad (III.27)$$

De plus, si on travaille sur des durées de plusieurs années, on peut considérer que l'équilibre (en terme de masse de produit) est atteint dans la nappe et que le terme transitoire est nul. On a alors:

$$M_{sat}(L) = \frac{Q}{\lambda_s} C(L) \quad (III.28)$$

Dans le cas où le régime hydrodynamique est permanent et uniforme sur la colonne de sol non saturé, la concentration en produit à une profondeur L' peut se déduire de la concentration à une profondeur $L < L'$, en faisant l'hypothèse d'un transport convectif et d'une cinétique de dégradation linéaire:

$$M_{sat}(L') = M_{sat}(L) \cdot e^{-\lambda_{ns} t(l)} \quad (III.29)$$

où λ_{ns} (s^{-1}) est le taux de dégradation du produit dans la zone non saturée et $t(l)$ est la durée nécessaire au produit pour couvrir la distance verticale $l = L' - L$.

Une telle approche est analogue à celle qu'utilisent par exemple Rao & al (1985) pour la définition du facteur d'atténuation AF, ou Meeks & Dean (1990) pour l'indice LPI (Cf. § I-6.2.3.). La durée $t_C(L)$ (s) de transfert convectif sur une distance verticale L est donnée par:

$$t_C(L) = \frac{\theta R_{ns}}{Q} L \quad (III.30)$$

où R_{ns} est le facteur retard dans la zone non saturée, et θ la teneur en eau dans la zone non saturée.

Nous proposons pour la valeur de θ une hypothèse différente de celle qui préside à la définition de AF et de LPI; dans ces deux indices, on suppose que la teneur en eau θ correspond à celle de la capacité au champ. Or, si l'on fait l'hypothèse d'un régime uniforme et permanent dans la colonne de sol, on a :

$$K(\theta) = Q \quad (III.31)$$

En supposant que la teneur en eau et la conductivité hydraulique sont liées par une relation du type Averjanov:

$$K(\theta) = K_s \left(\frac{\theta}{\theta_s} \right)^b \quad (III.32)$$

on obtient:

$$\theta = \theta_s \left(\frac{Q}{K_s} \right)^{1/b} \quad (III.33)$$

La durée de transfert t_C devient alors:

$$t_C(L) = \frac{\theta_s \left(\frac{Q}{K_s} \right)^{1/b} R_{ns}}{Q} L \quad (III.34)$$

Or, d'après (III.29), on a:

$$\ln M_{sat}(L') = \ln M_{sat}(L) - \lambda_{ns} t_C(L) \quad (III.35)$$

Donc:

$$\ln M_{sat}(L') = \ln M_{sat}(L) - \lambda_{ns} \frac{\theta_s \left(\frac{Q}{K_s} \right)^{1/b} R_{ns}}{Q} (L' - L) \quad (III.36)$$

Le logarithme de la masse de produit contenu dans l'aquifère suit donc une loi affine en fonction de la distance entre la surface du sol et la nappe. (III.36) peut donc se mettre sous la forme:

$$\ln M_{sat}(L) = A - B \lambda_{ns} \frac{\theta_s \left(\frac{Q}{K_s} \right)^{1/b} R_{ns}}{Q} L \quad (III.37)$$

A et B (adimensionnels) étant les constantes caractérisant la loi affine, à déterminer à partir des résultats de simulation pour une valeur particulière du taux d'épandage, de la position de la nappe et de la recharge.

La masse M_{sat} étant proportionnelle à la quantité d'épandage Q_p de produit phytosanitaire à la surface du sol, (III.37) s'écrit encore:

$$\ln M_{sat}(L) = A' + \ln(Q_p) - B \lambda_{ns} \frac{\theta_s \left(\frac{Q}{K_s} \right)^{1/b} R_{ns}}{Q} L \quad (III.38)$$

Nous allons examiner par la suite dans quelles circonstances les simplifications ci-dessus peuvent être appliquées.

III.4.3. Domaine de validité des simplifications

D'après l'équation (III.21), le flux en produit phytosanitaire F_{sat} transitant vers la nappe est, à une profondeur z donnée:

$$F_{sat}(z,t) = Q(z,t) C(z,t) \\ = \left[\bar{Q}(z) + q(z,t) \right] \left[\bar{C}(z) + c(z,t) \right] \quad (III.39)$$

$Q(z)$ étant décomposé en deux termes: $\bar{Q}(z)$ la recharge moyenne au cours du temps et $q(z,t)$ la fluctuation à la valeur moyenne, telle que \bar{q} est nulle par définition. La même notation est appliquée à la concentration.

On calcule le flux moyen $F_{moy}(z)$ sur une période $[0,T]$:

$$F_{moy}(z) = \frac{1}{T} \int_0^T F_{sat}(z,t) dt \\ = \frac{1}{T} \int_0^T \bar{Q}(z) \bar{C}(z) dt + \frac{1}{T} \int_0^T \bar{Q}(z) c(z,t) dt + \frac{1}{T} \int_0^T q(z,t) \bar{C}(z) dt + \frac{1}{T} \int_0^T q(z,t) c(z,t) dt \quad (III.40)$$

Par définition, la seconde et la troisième intégrales sont nulles. Il reste donc:

$$F_{moy}(z) = \bar{Q}(z) \bar{C}(z) + \frac{1}{T} \int_0^T q(z,t) c(z,t) dt \quad (III.41)$$

Si l'on est situé à une profondeur suffisamment importante pour que la partie résiduelle du terme de concentration puisse être considérée comme nulle, le flux moyen au cours du temps se résout à:

$$F_{moy}(z) = \bar{Q}(z) \bar{C}(z) \quad (III.42)$$

Les conditions dans lesquelles la partie résiduelle du terme de concentration est nulle sont examinées ci-dessous.

III-4.3.1. Conditions requises pour une concentration résiduelle nulle: analyse harmonique

Supposons que l'on soit situé à une profondeur z_0 telle que les prélèvements racinaires par la végétation soient nuls. Nous allons rechercher à partir de quelle distance de z_0 la concentration peut être considérée comme constante. Nous allons pour cela effectuer une analyse harmonique, en supposant que nous sommes à une profondeur suffisante pour que l'amplitude de la fluctuation q soit négligeable par rapport à la valeur moyenne \bar{Q} de la recharge (régime hydraulique pouvant être considéré comme permanent).

L'équation du transport en régime hydraulique permanent devient alors:

$$R \theta \frac{\partial C}{\partial t} = -Q \frac{\partial C}{\partial z} + \alpha_L Q \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \lambda \theta C \quad (III.43)$$

Et on suppose connue la concentration $C(z_0,t)$.

Cette concentration peut être décomposée, sur la période $[0,T]$, en série de Fourier:

$$C(z, t) = \sum_{k=1}^{+\infty} C_k^0 e^{i(\omega_k t + \phi_k)} \quad (III.44.a)$$

$$\omega_k = \frac{2 k \pi}{T} \quad (III.44.b)$$

ω_k et ϕ_k étant respectivement la pulsation et la phase correspondant à l'harmonique d'ordre k sur la période $[0, T]$

On recherche des solutions de l'équation (III.43) du type :

$$C(z, t) = \sum_{k=1}^{+\infty} C_k^0 e^{i(\omega_k t + \sigma_k z)} = \sum_{k=1}^{+\infty} C_k(z, t) \quad (III.45)$$

La recherche de la profondeur à partir de laquelle la concentration peut être considérée comme constante se ramène à la recherche du maximum des échelles intégrales associées aux fréquences ω_k .

D'après (III.44.a), pour l'harmonique k , on a:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = i \omega_k C_k \quad (III.46.a)$$

$$\frac{\partial C_k}{\partial z} = i \sigma_k C_k \quad (III.46.b)$$

$$\frac{\partial^2 C_k}{\partial x^2} = -\sigma_k^2 C_k \quad (III.46.c)$$

En substituant les formules (III.46) dans l'équation (III.43), on obtient une équation du second degré par rapport à σ_k , qui se résout en:

$$\sigma_k = -\frac{i}{\alpha_L} + \frac{\rho_k}{\alpha_L} e^{i\mu_k} \quad (III.47)$$

$\rho_k e^{i\mu_k}$ étant tel que:

$$\left[\rho_k e^{i\mu_k} \right]^2 = -1 - 4 \alpha \left(\frac{\lambda \theta}{Q} + \frac{i R \theta \omega_k}{Q} \right) \quad (III.48.a)$$

$$\sin \mu_k > 0 \quad (III.48.b)$$

La condition (III.48.b) provient du fait que l'amplitude de C_k diminue avec la profondeur (à cause de la dégradation et de la diffusion), ce qui veut dire que la partie imaginaire de σ_k est positive. L'échelle intégrale L_k^I associée à l'harmonique k est donnée par:

$$L_k^I = \frac{1}{\text{Im}(\sigma_k)} \quad (III.49)$$

L'échelle intégrale est d'autant plus petite que l'harmonique est élevée. Le maximum des échelles intégrales est donc celui de la première harmonique. Sur la figure III.4, nous avons indiqué, pour trois valeurs de la recharge Q (100, 200 et 300 mm/an, qui représentent respectivement une année sèche, moyenne et humide sur le site-test du bassin du Grand

Morin), et pour une valeur de θ de 0,2, les valeurs de L_k^I en fonction de la dispersivité α et de la durée de vie τ . On a pris pour base l'harmonique annuelle ($T = 1$ an.). La figure III.5 montre l'évolution de l'échelle intégrale, pour une même valeur de la recharge (200 mm/an), mais pour différentes harmoniques (mensuelle, annuelle, décennale).

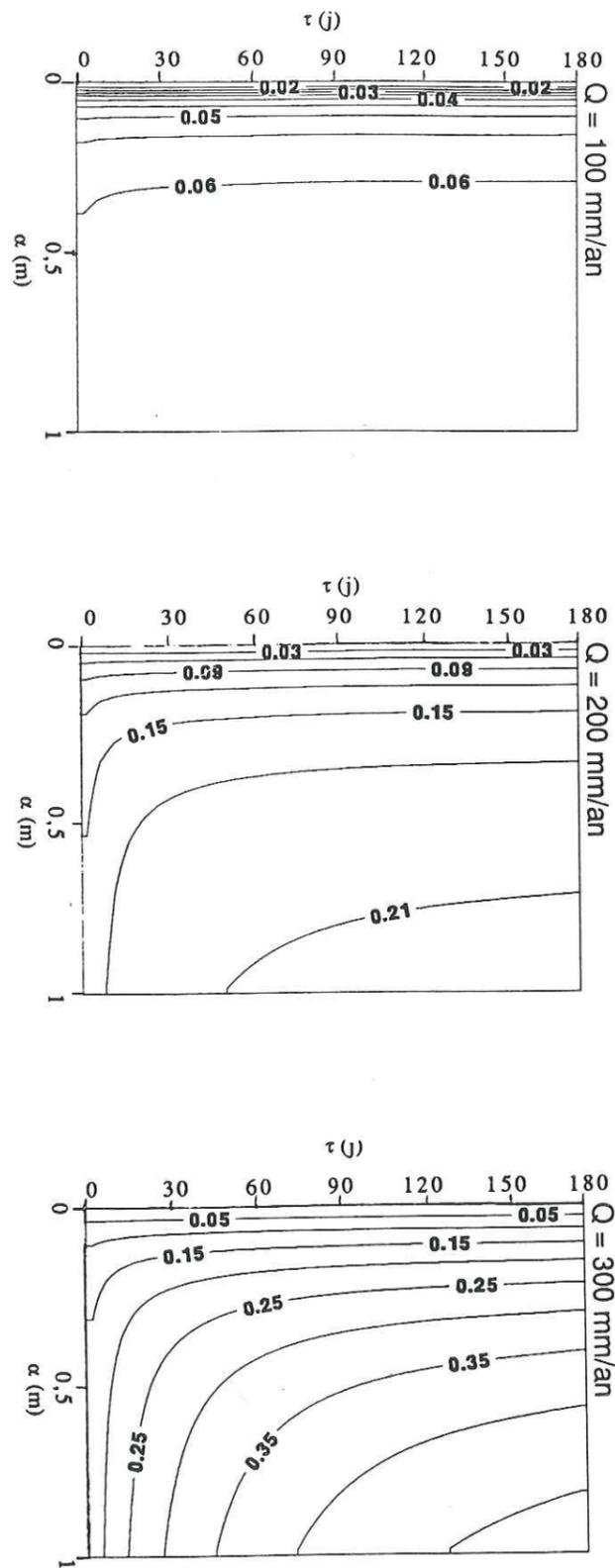
On peut tirer les conclusions suivantes:

- les harmoniques élevées possèdent des échelles intégrales beaucoup plus faibles que les harmoniques d'ordre faible: elles sont amorties plus rapidement. Ce phénomène est connu sous le nom d'"effet de peau". On voit en particulier (figure III.5) que, même dans l'hypothèse de grandes durées de vie et de dispersivités élevées, les variations mensuelles de concentration en produit phytosanitaire sont pratiquement éliminées après un trajet de quelques décimètres dans le sol. En revanche, il faudra une distance de l'ordre du mètre pour lisser l'harmonique décennale.
- plus la durée de vie est courte, plus une harmonique donnée est amortie (du fait du "lissage" des variations temporelles par le phénomène de dégradation) et plus la dispersivité est grande, plus l'amortissement est faible. L'accroissement du facteur de retard équivaut à diminuer la durée de vie du produit et la dispersivité: il conduit à un accroissement de l'amortissement des harmoniques.
- En pratique, une distance de l'ordre du mètre est suffisante pour éliminer les variations de concentration liées aux apports annuels ou semestriels en produits phytosanitaires. Après un parcours de l'ordre du mètre dans la direction verticale, le flux moyen en produit phytosanitaire peut donc être considéré comme une fonction exponentielle décroissante de la profondeur.

On notera d'après (III.48.a) qu'une augmentation du facteur retard à valeur constante de l'harmonique conduit à une diminution de l'échelle intégrale: les valeurs que nous donnons ici étant établies pour la valeur minimale possible du facteur retard, elles surestiment les valeurs des échelles intégrales. Lorsque l'adsorption intervient, la simplification que nous avons exposée peut donc être appliquée à partir de profondeurs moindres; les valeurs d'échelles intégrales fournies ici vont donc dans le sens de la sécurité.

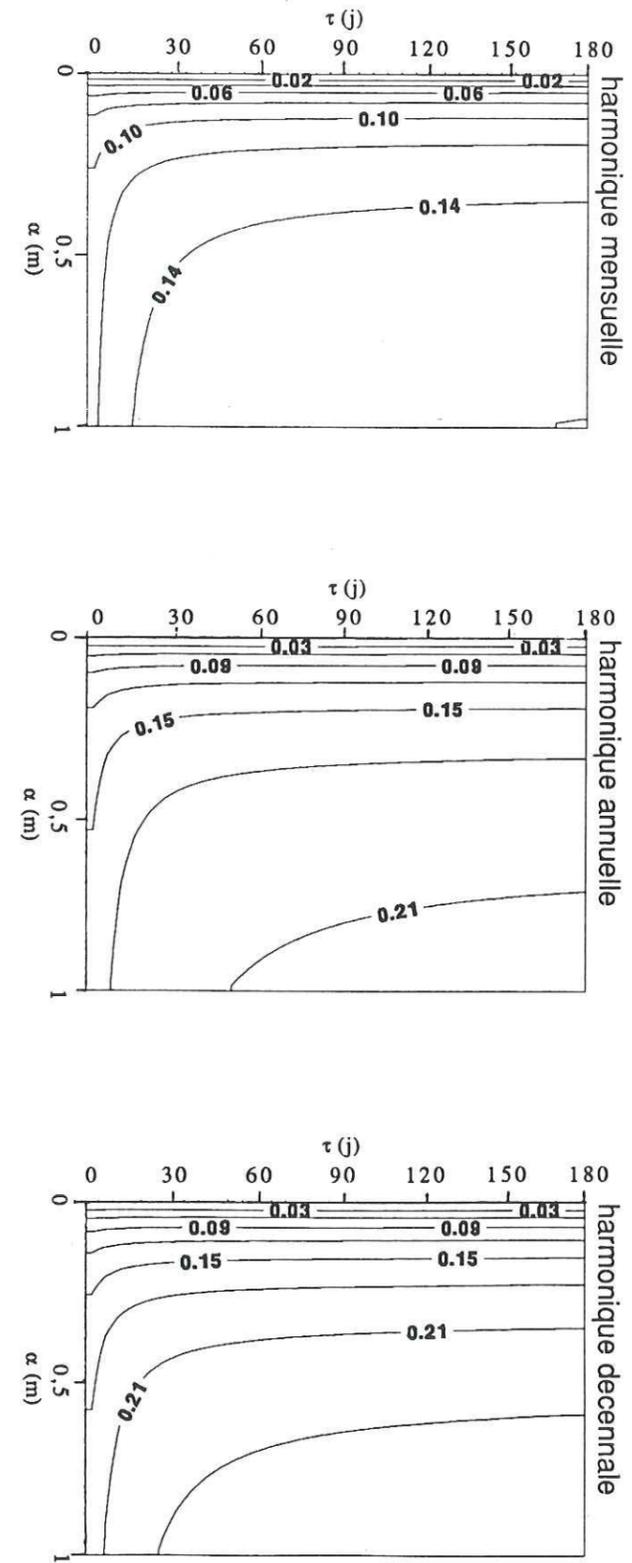
III-4.3.2. Validation de l'analyse harmonique - mise en oeuvre de la simplification

L'analyse ci-dessus a été validée par des simulations du transport de produits phytosanitaire dans la zone non saturée, à l'aide du logiciel LEACHP (Wagenet et Hutson, 1989). Nous avons effectué des simulations en faisant varier les paramètres suivants : conductivité hydraulique à saturation du sol, dispersivité longitudinale, durée de vie du produit.



N.B. : Les isovaleurs des échelles intégrales sont données en m.

Figure III.4 : Échelles intégrales pour différentes valeurs de recharge pour l'harmonique annuelle



N.B. : Les isovaleurs des échelles intégrales sont données en m.

Figure III.5 : Échelles intégrales pour différentes harmoniques pour une recharge de 200 mm/an

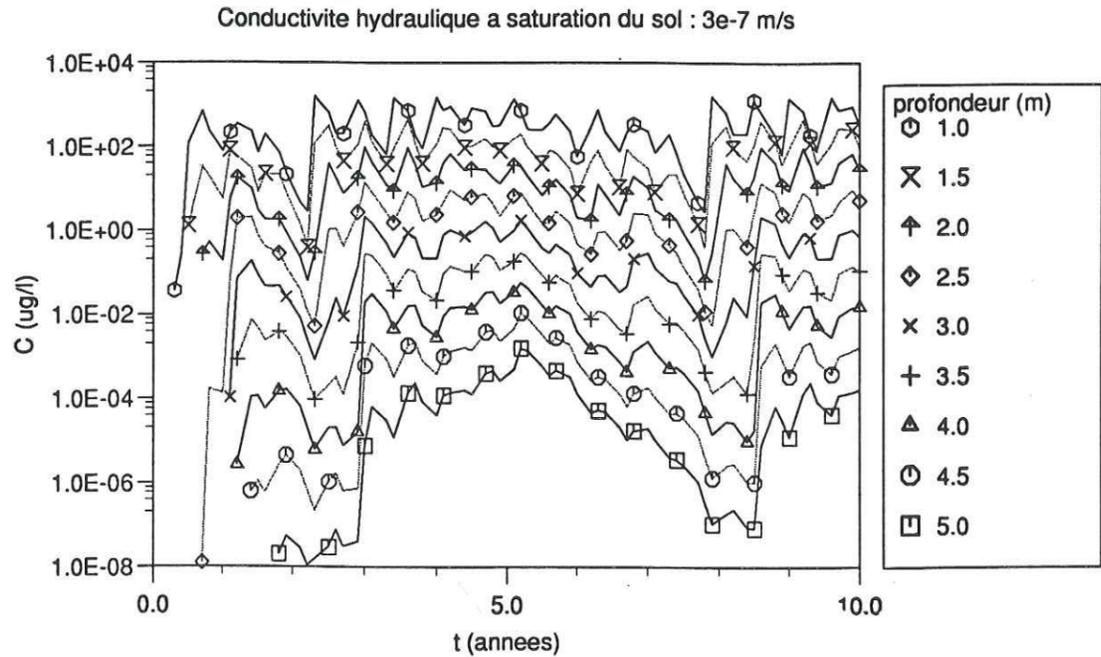
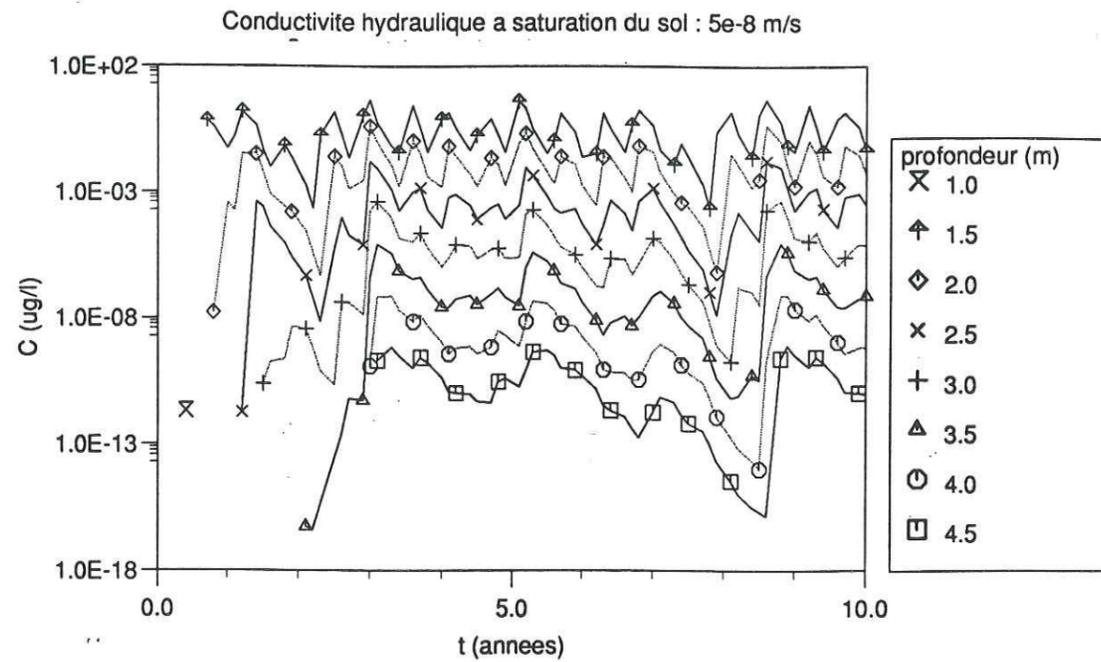


Figure III.6 : Concentrations à différentes profondeurs pour deux valeurs différentes de la conductivité hydraulique à saturation, pour une recharge de 200 mm/an

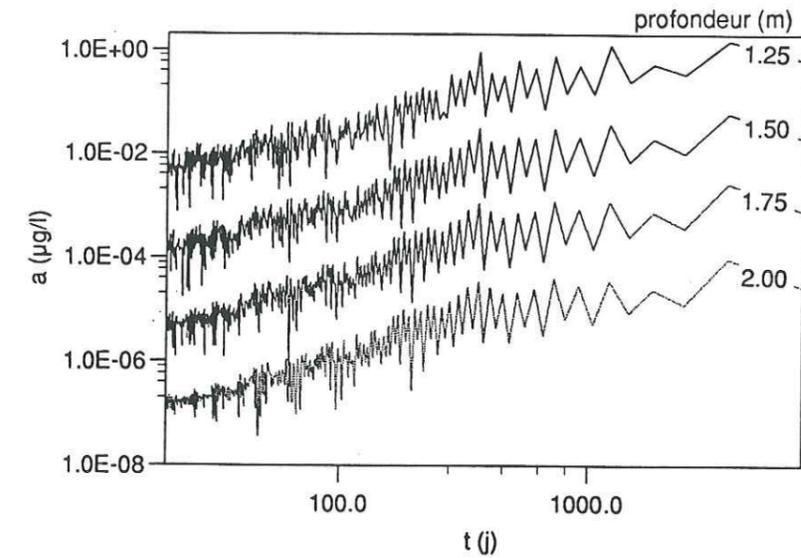


Figure III.7: Coefficients de Fourier de la concentration dans l'aquifère en fonction du temps

Les figures III.6 à III.8 montrent que, dans la plage de variation des paramètres, le flux qui parvient à la nappe (et donc la masse d'équilibre M_{sat}) sont une fonction exponentielle décroissante de la profondeur. En effet, en superposant les courbes d'évolution de la concentration (en valeur logarithmique) en fonction du temps à des profondeurs différentes (Cf. figure III-6), on constate que ces courbes sont caractérisées par un décalage pratiquement constant. L'altération du décalage entre les courbes pour des profondeurs de l'ordre de 1 à 2 mètres peut être expliquée par le fait que la profondeur atteinte n'est pas suffisante pour que la simplification soit réellement applicable.

III-4.4. Influence de la conductivité hydraulique à saturation

On rappelle la formulation de la fonction de transfert (équation III.38) obtenue au paragraphe III-4.2.:

$$\ln M_{sat}(L) = A' + \ln(Q_p) - B \frac{\theta_s \left(\frac{Q}{K_s}\right)^{1/b} R_{ns}}{Q} L$$

Rappelons que les hypothèses qui sous-tendent cette formulation sont identiques à celles qui permettent de définir l'indice de vulnérabilité AF (Rao et al., 1985. cf. § I-6.3.). La différence entre ce dernier et la formulation (III.38) est que nous postulons que la conductivité hydraulique à saturation et le régime hydrique (la recharge) influent sur la teneur en eau

moyenne dans la zone non saturée, alors que l'hypothèse de base de l'indice AF est que la teneur en eau est constante, égale celle de la capacité au champ. Afin de valider notre approche, nous avons effectué plusieurs simulations du transport d'atrazine dans la zone non saturée, pour différentes profondeurs de nappe (1,5; 1,75; 2; 2,25; 2,5 et 2,75 m) et différentes valeurs de la conductivité à saturation ($5 \cdot 10^{-8}$, 10^{-7} , $3 \cdot 10^{-7}$ et $6 \cdot 10^{-7}$ m.s $^{-1}$). Le régime de précipitation était pris identique dans tous les cas, ainsi que la durée de vie du produit (30 jours). Le facteur retard est pris égal à 1 (pas de matière organique dans le sol). Le taux d'application est de 100 kg par hectare. Bien qu'un tel taux soit irréaliste, la linéarité de la relation entre taux d'épandage et masse de produit contenu dans la nappe autorise d'adopter une valeur arbitraire du taux d'épandage. L'avantage d'un taux d'épandage élevé est uniquement numérique (éviter les erreurs d'arrondi pour des distances surface-nappe élevées). L'exposant d'Averjanov a été pris égal à 10.

La figure III.8, qui montre les résultats de calcul, illustre la dépendance des quantités de produit parvenant à la nappe par rapport aux caractéristiques hydrodynamiques du sol.

Une des conséquences de (III.38) est la suivante: soit M_{ij} la masse obtenue dans l'aquifère avec une profondeur de nappe L_i et une conductivité hydraulique K_j . Quelles que soient les valeurs adoptées, (III.38) implique la relation:

$$\frac{\ln M_{12} - \ln M_{22}}{\ln M_{11} - \ln M_{21}} = \left(\frac{K_1}{K_2} \right)^{1/b} \quad (III.50)$$

où b est l'exposant d'Averjanov. En particulier, pour $K_1 = 5 \cdot 10^{-8}$ et $K_2 = 6 \cdot 10^{-7}$ m.s $^{-1}$, pour $L_1 = 1,5$ m et $L_2 = 2,25$ m, on a $M_{11} = 9,8 \cdot 10^{-9}$ kg.m $^{-2}$, $M_{21} = 4,4 \cdot 10^{-15}$ kg.m $^{-2}$, $M_{12} = 2,2 \cdot 10^{-11}$ kg.m $^{-2}$ et $M_{22} = 4,6 \cdot 10^{-16}$ kg.m $^{-2}$. On obtient alors, par calcul direct, une valeur de 0,78 pour le premier membre de (III.37), alors que le calcul théorique donne 0,74. Le décalage à l'origine observé entre les courbes tient au fait que le prélèvement racinaire, l'évaporation, etc... sont modifiés par le changement de conductivité hydraulique.

III-4.5. Conclusions

Le paragraphe III-4. a permis d'établir les résultats suivants:

- pour des profondeurs supérieures à l'ordre du mètre dans la zone non saturée, les termes transitoires des flux de produits phytosanitaires sont suffisamment atténués pour que l'on puisse ne considérer que les flux moyens en produits et en eau (recharge annuelle de la nappe, taux d'application annuel des produits). L'utilisation de formules simplifiées pour le calcul des flux en produit phytosanitaires transitant vers la nappe est alors entièrement justifiée (en particulier, l'emploi de l'indice AF).

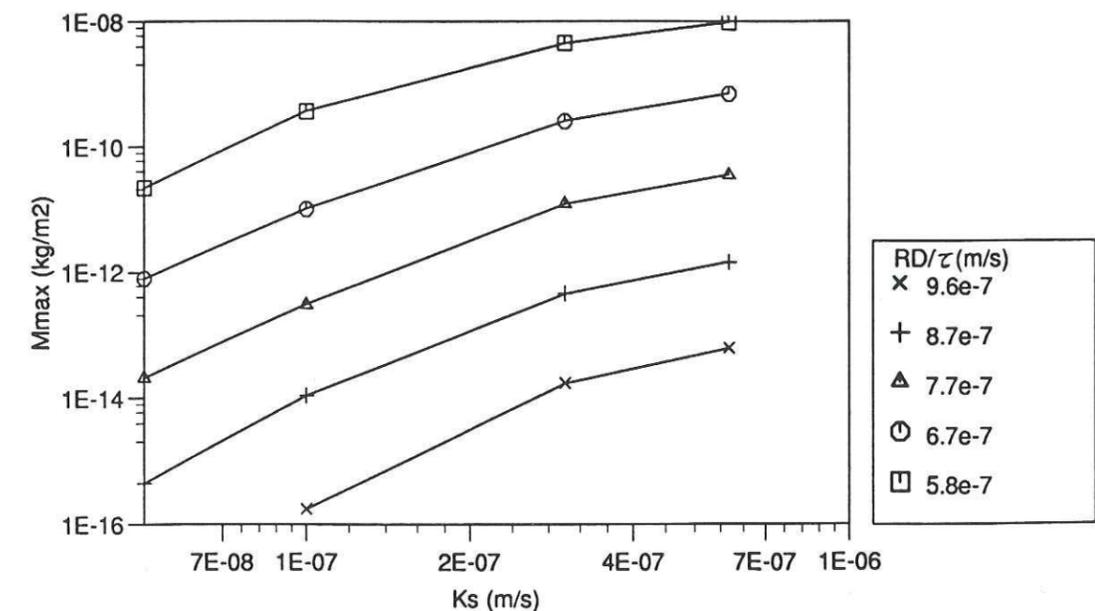
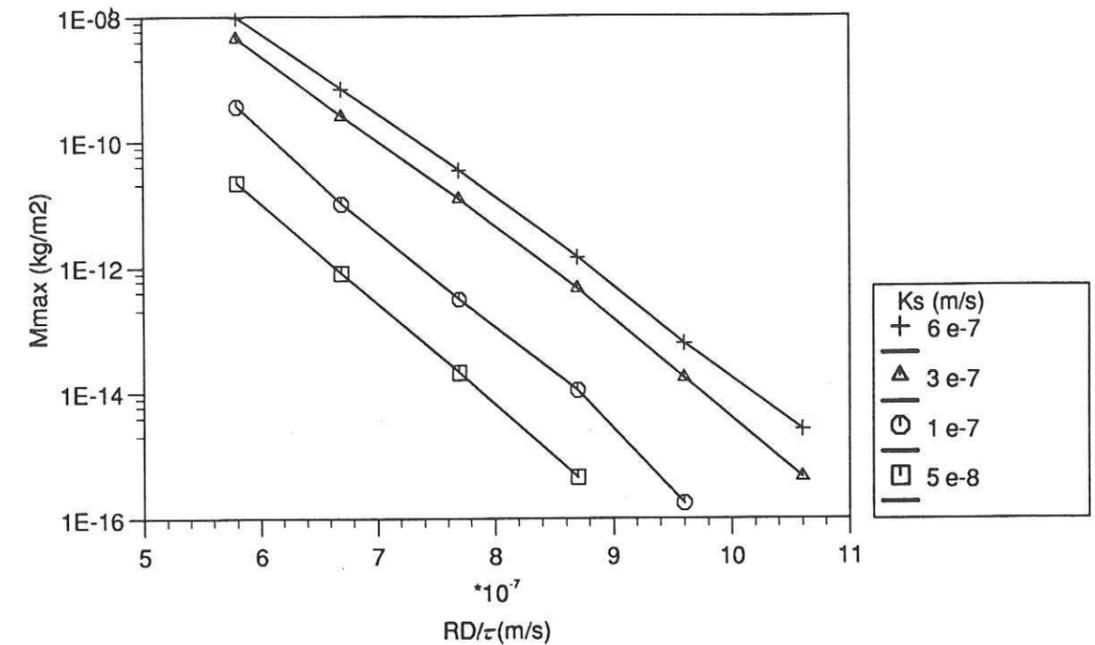


Figure III.8: Valeurs du maximum de la concentration dans la nappe pour différentes valeurs de la distance surface-nappe et de la conductivité hydraulique à saturation du sol

Dans l'utilisation de ces formules, il est possible de prendre en compte l'influence, sur la vitesse de transfert des produits, de la conductivité hydraulique à saturation du sol: nous avons appliqué la formule d'Averjanov pour relier la teneur en eau moyenne à la conductivité hydraulique et à la recharge. Les résultats de calcul montrent que cette approche est pertinente. Nous sommes donc en mesure de proposer une nouvelle formulation de l'indice AF:

$$AF_{mod} = e^{-\lambda t_C} \quad (III.51.a)$$

$$t_C(L) = \frac{\theta_s \left(\frac{Q}{K_s}\right)^{1/b} R_{ns}}{Q} L \quad (III.51.b)$$

où λ (s^{-1}) est le taux de dégradation du produit phytosanitaire, θ_s la teneur en eau volumique à saturation du sol, Q ($m.s^{-1}$) la recharge, K_s ($m.s^{-1}$) la conductivité hydraulique à saturation du sol, b l'exposant d'Averjanov, R_{ns} le facteur retard dans la zone non saturée et L (m) la distance verticale parcourue.

III-5. APPLICATION A UN SITE-TEST

III-5.1. Présentation du site

Le site-test sélectionné est le bassin versant du Vannetin, situé en région parisienne (cf. figure III.9). Ce bassin est un sous-bassin de celui du Grand Morin, affluent en rive gauche de la Marne à Meaux. Ce choix s'explique par le fait que le bassin du Grand Morin fait partie des sites-test sélectionnés pour le projet ISMAP (ISMAP, 1993 b): il contribue en effet à l'alimentation en eau potable de la région parisienne.

Le bassin du Vannetin est le siège de pratiques agricoles extensives et les produits phytosanitaires y sont largement employés. Ce bassin comporte plusieurs agglomérations dont la plus importante est celle de Choisy-en-Brie. Ces agglomérations procèdent en général au captage des eaux souterraines à des profondeurs variant de la dizaine à la centaine de mètres, dans la nappe de Champigny.

Nous nous sommes intéressés ici à la protection des puits de pompage situés dans la ville de Choisy-en-Brie, par rapport à une contamination par l'atrazine.

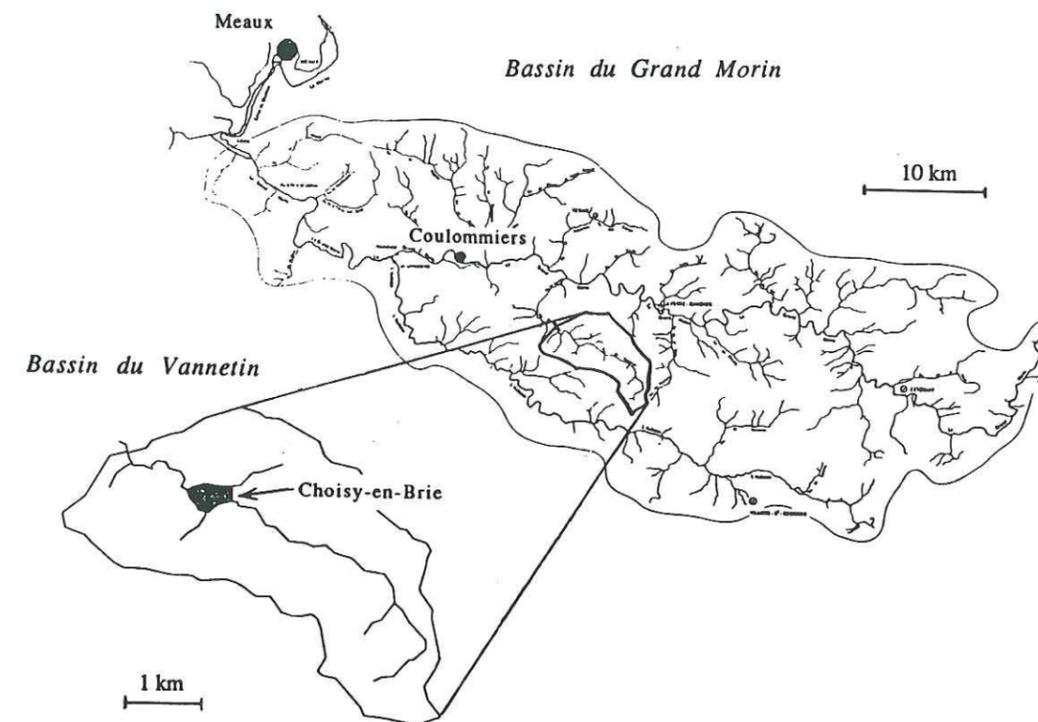


Figure III-9 : site-test choisi pour l'application de la méthodologie

III-5.2. Détermination de la concentration admissible dans l'aquifère

L'aquifère concerné est celui des calcaires de Champigny. Le champ des vitesses déterminé par la modélisation hydrologique exposée au chapitre II a été utilisé pour effectuer le calcul inverse du transport dans l'aquifère. La figure III-10 présente les champ calculé des vitesses de Darcy dans l'aquifère.

Le logiciel utilisé pour ces calculs inverses de transport est le logiciel ARGOS (Usseglio-Polatera and Holly, 1984; Usseglio-Polatera and Cunge, 1985). Ce logiciel simule de manière découplée le transport et la dégradation linéaire de soluté. Le processus de convection est simulé à l'aide d'une méthode de suivi de particules associée à celle des caractéristiques: nous verrons dans l'annexe AII que cette méthode est la seule praticable dans le cas de calculs inverses de transport dans l'aquifère, une méthode classique aux différences finies classique entraînant l'apparition d'instabilités numériques qui rendent inutilisables les résultats de calcul.

Les paramètres du modèle de transport sont indiqués dans le tableau III-1 ci-dessous. La valeur de la porosité du calcaire de Champigny provient de résultats d'essais de pompage (Mégnyen, 1979; BURGEAP, 1993).

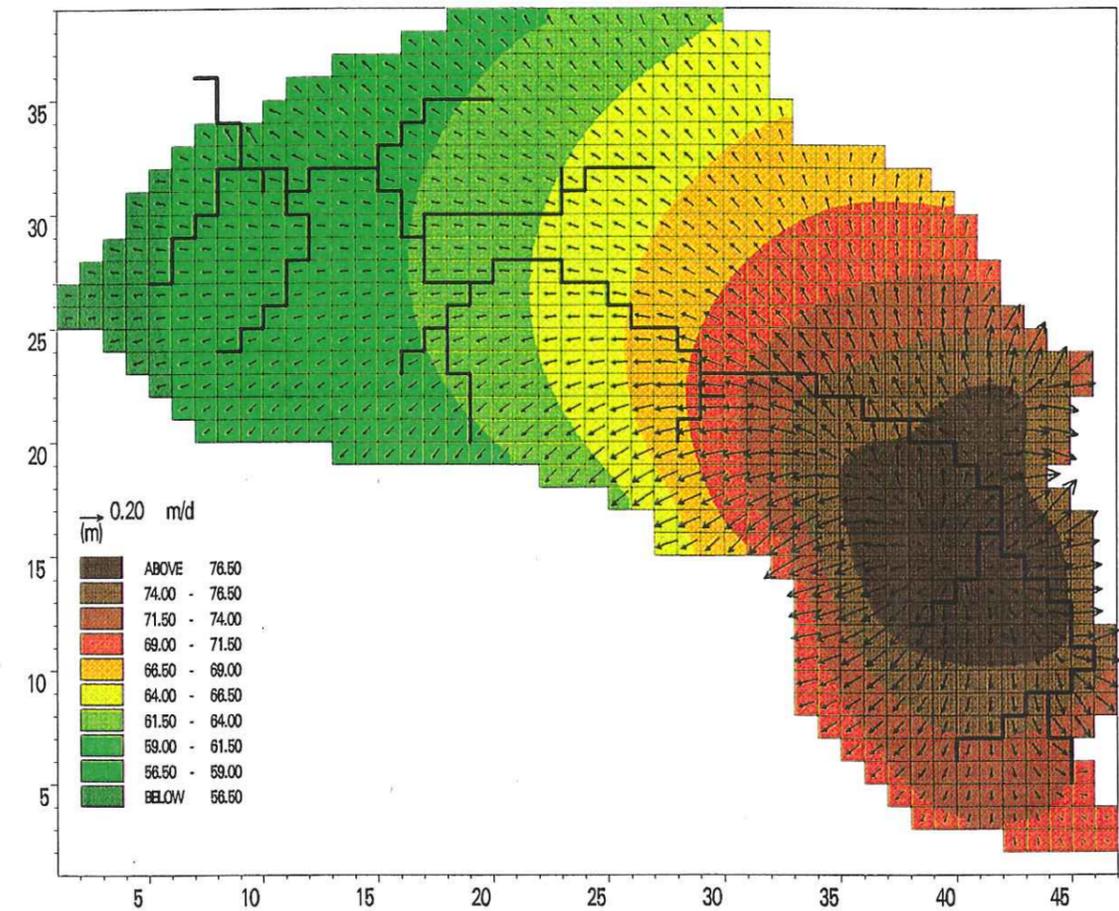


Figure III-10: Champ calculé des vitesses de Darcy dans l'aquifère de Champigny

La durée de vie de l'atrazine dans l'aquifère a été prise égale à deux ans, ce qui correspond à un ordre de grandeur généralement admis pour les processus de dégradation anaérobies (voir le chapitre I). La fraction de matière organique dans les aquifères étant en général très faible d'une part (0,1 % environ), l'écoulement dans un massif comme celui du calcaire de Champigny étant en général localisé dans les fractures, on peut considérer que les phénomènes d'adsorption et de dégradation liés au contact entre phase solide et liquide sont négligeables: l'hypothèse d'une dégradation ayant lieu en phase liquide uniquement conduit à négliger le processus d'adsorption, donc à adopter un facteur retard unitaire dans l'équation du transport.

Les calculs de transport ont été effectués sur un maillage carré, de 40 m de côté. Le champ de vitesse dans l'aquifère calculé par MIKE SHE a été interpolé bilinéairement sur ce maillage plus fin. La même méthode a été utilisée pour l'interpolation de la topographie et du toit de la nappe.

Paramètre	Valeur
Porosité de l'aquifère	5 %
Fraction de carbone organique	0,1 %
Durée de vie du produit	2 ans

Tableau III-1 : paramètres retenus pour le modèle de transport dans l'aquifère

De petites agglomérations comme celles de Choisy-en-Brie ne disposent pas d'usine de traitement des produits phytosanitaires dans les eaux de pompage. Nous avons donc effectué le calcul de transport dans l'aquifère en imposant, à la frontière est de Choisy-en-Brie, une concentration de captage admissible C_0 égale à $0,1 \mu\text{g.l}^{-1}$, ce qui correspond à la norme européenne de potabilité de l'eau (Décret 89-3 du 3 janvier 1989).

Le champ C_a de concentration admissible en aquifère satisfait, on le rappelle, l'équation suivante:

$$C_a(x,y) = C_0 \cdot e^{-\lambda t_C(x,y)} \quad (\text{III.52})$$

où $t(x,y)$ est la durée de transfert de l'eau entre la frontière captage et le point de coordonnées (x,y) , selon la vitesse V_f . La méthode de suivi de particules du logiciel ARGOS permet d'établir une relation univoque entre la durée de transfert $t_C(x,y)$ et les coordonnées (x,y) de tout point de l'aquifère, donc d'obtenir, en tout point (x,y) , la valeur $C_a(x,y)$.

La figure III-11 montre la concentration admissible dans la nappe de Champigny au voisinage de Choisy-en-Brie.

Les points les plus éloignés de la frontière est de la ville correspondent à des durées de transfert de 20 ans environ, donc à des concentrations admissibles de l'ordre du milligramme par litre. Les points de l'aquifère situés en-dehors des lignes de courant passant par la frontière est de la ville n'ont aucune possibilité de contaminer les captages lors d'un transport convectif: la concentration admissible en ces points est donc égale à la limite de solubilité de l'atrazine, c'est à dire 30 mg.l^{-1} . Rappelons que les points où la concentration admissible est la plus faible sont ceux qui représentent le risque de contamination le plus élevé.

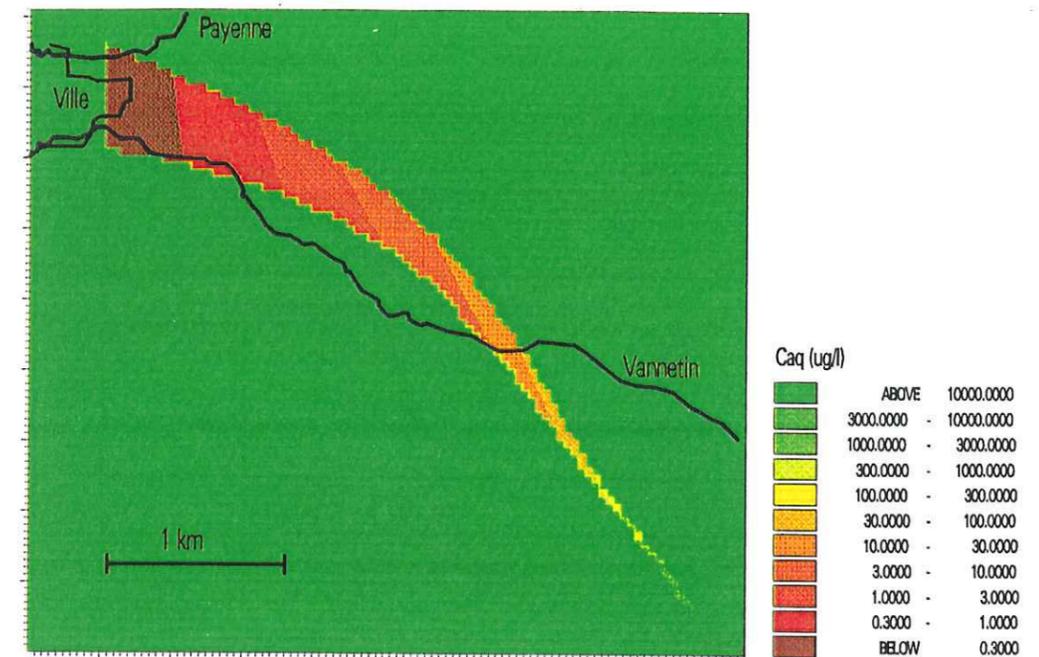


Figure III-11 : concentration admissible dans l'aquifère

III-5.3. Détermination de la pression de pollution admissible

La zone non saturée située au-dessus du panache de concentration, voisine du thalweg du Vannetin, est constituée par un type de sol fortement limoneux (SOGREAH, 1961). La fraction de matière organique y est importante (2,5 % environ d'après une étude effectuée sur un sol similaire - Jones, 1993). Les phénomènes d'adsorption et de dégradation y jouent donc un rôle non négligeable vis-à-vis du devenir de l'atrazine.

Le logiciel utilisé pour la modélisation du transport dans la zone non saturée est LEACHP (Wagenet et Hutson, 1989). Une application exhaustive de la méthodologie aurait consisté à effectuer les calculs de transport dans la zone non saturée en chaque point du maillage et à retrouver, par approximations successives, les quantités d'épandage admissibles en ces points. Cependant, les simplifications dégagées au paragraphe II-4 permettent de n'effectuer que deux simulations du transport, avec deux profondeurs de nappe différentes. On peut alors en déduire la relation exponentielle qui lie la masse contenue dans l'aquifère au taux d'épandage:

$$Q_p = k_1 M_{max} e^{k_2 L} \quad (III.53)$$

Deux simulations du transport de produit phytosanitaire ont été effectuées, sur une durée de 20 ans, avec deux profondeurs de nappe différentes (Cf. tableau III-2), pour un taux d'épandage de 100 kg.ha⁻¹. Bien que ce taux soit irréaliste, il permet d'obtenir des valeurs de

on s'en
appelle

M_{\max} suffisamment élevées pour éviter les imprécisions numériques liées aux erreurs d'arrondi.

Paramètre	Signification	Valeur
K_s	Conductivité hydraulique à saturation	$3.10^{-7} \text{ m.s}^{-1}$
ρ_d	Masse volumique du sol sec	$1,5.10^3 \text{ kg.m}^{-3}$
f_{oc}	Fraction de carbone organique du sol	2,5 %
K_{oc}	Coefficient de partition de l'atrazine sur le carbone organique	30
R	Facteur retard	1,1
τ	Durée de vie	15 jours
L	Distance surface du sol-nappe	1 m et 2 m

Tableau III-2: Paramètres des modèles LEACHP pour l'atrazine

Le tableau III-3 rassemble, pour les deux simulations, les valeurs du maximum M_{\max} de la masse de produit contenu dans l'aquifère.

L (m)	M_{\max} (kg.m^{-2})
1	$2,7.10^{-10}$
2	$2,7.10^{-16}$

Tableau III-3: Valeurs du maximum de la masse d'atrazine dans l'aquifère pour deux profondeurs de nappe

Ces valeurs donnent: $k_1 = 3,7.10^5$ et $k_2 = 6$. Le calcul de la pression de pollution admissible à la surface du sol a été effectué en tout point du maillage de 40 m de côté qui a servi au calcul de la concentration admissible dans l'aquifère, en appliquant la formule (III.53).

La figure III-12 montre la distance surface-nappe sur la zone d'intérêt, la figure III-13 indique la pression de pollution admissible qui en résulte.

La méthodologie proposée conduit à remettre en question le concept classique de périmètres de protection construits sur la seule base des durées de transfert dans l'aquifère.

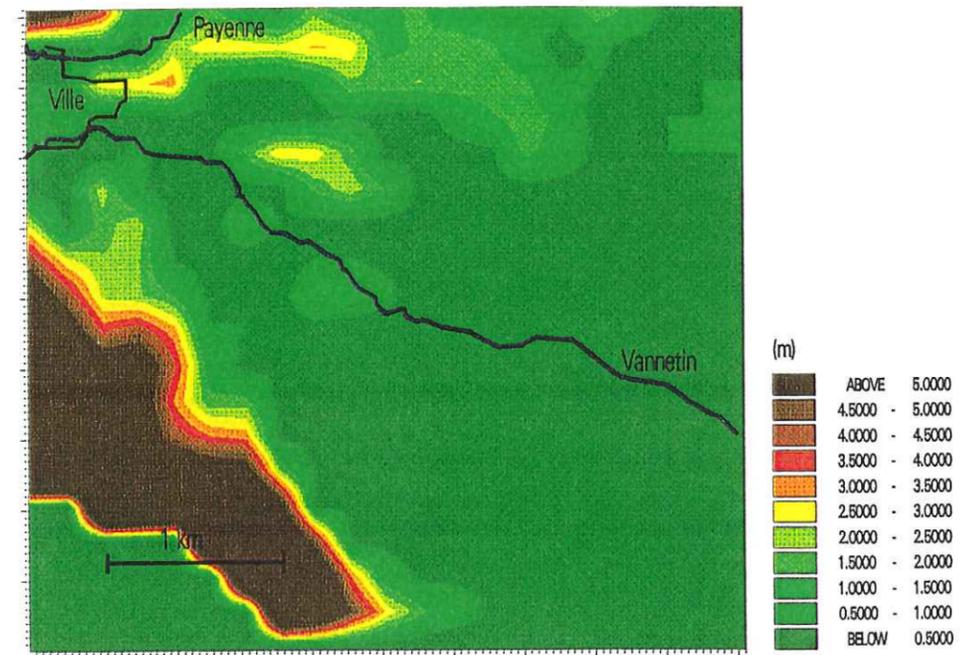


Figure III-12: distance surface du sol-nappe

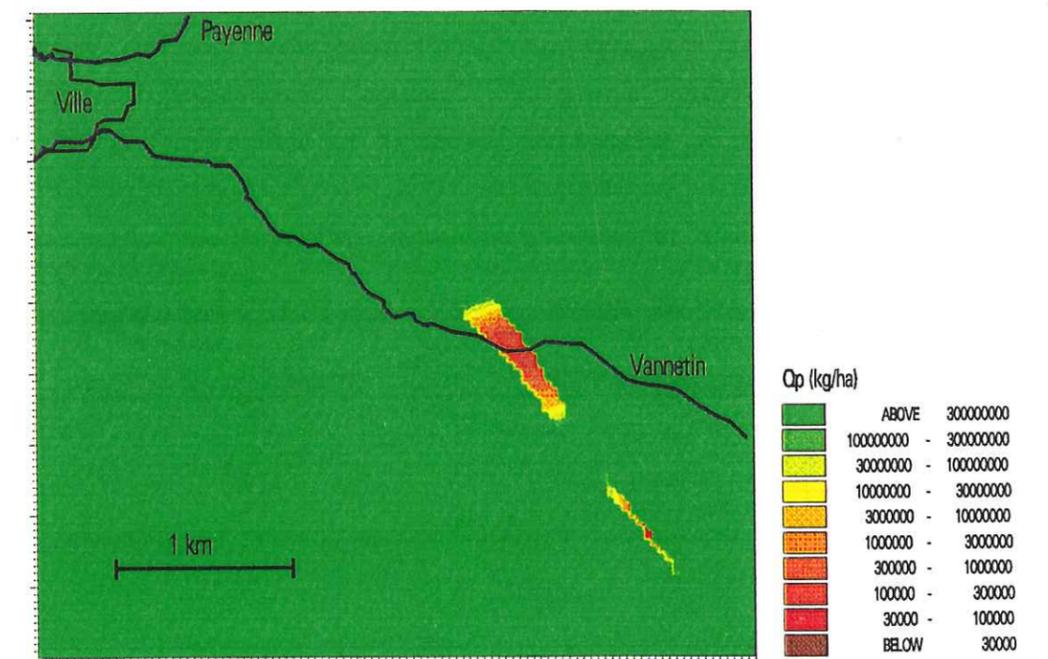


Figure III-13 : pression de pollution admissible

De tels périmètres sont en effet centrés sur le puits de pompage, alors que nos résultats permettent d'envisager que le captage soit plus vulnérable à une pollution en des points plus éloignés, du fait d'une distance surface-nappe plus faible qu'en des points plus proches. On rappellera également que ces périmètres de protection dépendent des caractéristiques du produit phytosanitaire.

III-6. CONCLUSIONS

Nous avons présenté une méthodologie permettant la détermination de la pression de pollution admissible en produits phytosanitaires à la surface du sol. Cette méthodologie est une approche alternative au concept de vulnérabilité, sur lequel elle présente l'avantage de fournir des indications concrètes aux exploitants agricoles et aux décideurs quant à l'utilisation des produits phytosanitaires.

Par rapport aux méthodes existantes d'estimation de la vulnérabilité, la méthodologie présente également l'avantage de tenir compte des deux composantes majeures des transferts de contaminant: une composante verticale dans la zone non saturée et une composante horizontale dans l'aquifère.

Cette méthode présente l'inconvénient suivant: les calculs inverses de transport dans l'aquifère sont effectués suivant l'hypothèse d'un transport convectif pur. En réalité, la dispersion transversale dans l'aquifère autorise la contamination du puits de pompage à partir de points de l'aquifère qui ne sont pas placés sur sa trajectoire (cf. figure III-12).

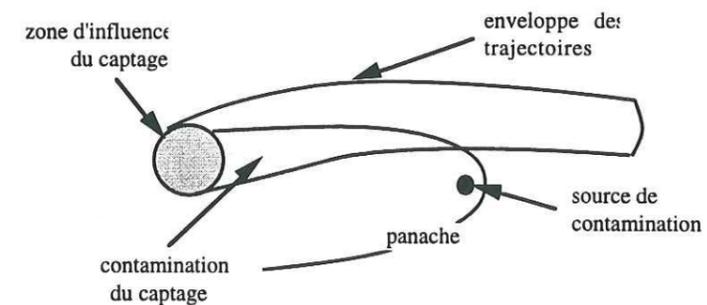


Figure III-14 : Contamination de la zone d'influence du pompage à partir d'un point extérieur à l'enveloppe des trajectoires

Nous n'avons pas, à l'heure actuelle, trouvé le moyen de prendre en compte le phénomène de diffusion/dispersion dans les calculs inverses du transport. On sait en effet que l'inversion

de la coordonnée temporelle mène souvent, en présence de phénomènes irréversibles tels que la diffusion, à des problèmes mal posés au sens mathématique (Yeh, 1986). Ce type de problème se rencontre dans tous les domaines où la causalité est inversée (entre autres, l'identification de paramètres par des méthodes inverses, Cf. Yeh and Sun [1984], Yeh [1987]).

En raison de l'incertitude sur les variations des paramètres des modèles de transport utilisés, les valeurs calculées ici pour la pression de pollution admissible ne doivent pas être considérées comme un guide absolu pour l'emploi des produits phytosanitaires: il nous a paru nécessaire de compléter les résultats obtenus par une analyse d'incertitude: en incorporant la description statistique des caractéristiques des sols et de l'aquifère dans les modèles de transport, on obtiendra alors, en tout point de la zone cartographiée, une pression de pollution admissible, associée à une probabilité de dépassement (*i.e.* la probabilité pour que la pression de pollution admissible en un point soit supérieure à celle que l'on a calculée).

Les modalités et les résultats de cette analyse d'incertitude sont l'objet du chapitre IV de ce mémoire.

IV - DETERMINATION DE LA PRESSION DE POLLUTION ADMISSIBLE: PRISE EN COMPTE DE LA VARIABILITE SPATIALE

Résumé

Les résultats de cartographie de la pression de pollution admissible sont soumis à une incertitude due à la méconnaissance des paramètres de l'hydrodynamique et du transport sur les sites cartographiés. La quantification de cette incertitude est l'objet du présent chapitre.: par le biais de simulations de Monte Carlo, on étudie ici l'impact, sur les résultats, de l'incertitude sur les conductivités hydrauliques et sur les durées de vie dans les zones saturée et non saturée. On montre notamment que la structure spatiale des champs de perméabilités et de durée de vie dans l'aquifère ont une influence sur l'incertitude des résultats - ce qui peut avoir des conséquences sur l'échantillonnage des réseaux de mesure.

IV-1. OBJECTIFS ET METHODES DE PRISE EN COMPTE DE L'INCERTITUDE

IV-1.1. Motivation de l'approche

Le chapitre III a décrit la méthodologie de détermination de la pression de pollution admissible en produits phytosanitaires à la surface du sol, ainsi que les résultats obtenus sur le bassin du Vannetin pour l'atrazine. Ces résultats s'appuient sur l'hypothèse que les paramètres hydrologiques et physico-chimiques du sol sont homogènes, connus de façon certaine sur l'étendue du site. Or, nous ne disposons pas (Cf. chapitre III) de données précises sur ces paramètres; au contraire, les études précédemment effectuées sur ce site (Mégny, 1979; BURGEAP, 1993) insistent sur l'hétérogénéité des formations qui le composent. On sait également que les paramètres régissant l'hydraulique et le transport en milieu souterrain sont fortement variables dans l'espace (Gelhar, 1983; Dagan, 1982, Delhomme, 1979), voire dans le temps (dépendance des réactions chimiques par rapport à la température, au pH, etc). Les résultats fournis au chapitre III ne sont donc pas suffisants pour une utilisation par des décideurs ou des exploitants agricoles: il est indispensable, lorsque l'on fournit des cartes de pression de pollution admissible (ou de vulnérabilité), de fournir en même temps une carte d'évaluation de l'incertitude sur ces résultats (Loague et al., 1989.c). Nous avons vu également dans le chapitre I que la notion de risque de contamination de la ressource en eau était la seule réponse pratique que l'on peut opposer, dans une optique de prévention de la contamination, à l'incertitude sur les caractéristiques du milieu naturel. Cette analyse est effectuée ici par le biais d'une analyse d'incertitude: la méthodologie mise en oeuvre et les résultats de cette analyse sont l'objet du présent chapitre.

IV-1.2. Retour sur la notion de risque de contamination

L'approche de la contamination de la ressource en eau par le biais de l'analyse de risque est à présent largement répandue. On citera comme exemple les travaux de Ünlü (1994), qui ont pour objet le risque de contamination des eaux souterraines par les fuites provenant de décharges: s'appuyant sur une description probabiliste des propriétés hydrauliques et physico-chimiques des zones saturée et non saturée du sol et de la nature des contaminants, Ünlü détermine une description statistique du niveau de contamination de l'aquifère (concentration à l'exutoire). Le risque de contamination d'un captage se déduit de cette description probabiliste à partir de la formulation (I.37):

$$\mathcal{R}(C_0) = 1 - F_r(C_0) \quad (IV.1)$$

où \mathcal{R} est le risque de contamination du captage, C_0 est la concentration admissible au niveau de ce captage et $F_r(C_0)$ est la probabilité de dépassement (déterminée par l'analyse d'incertitude) associée à C_0 .

La définition (IV.1) met en évidence le fait que le risque de contamination de la ressource en eau dépend non seulement de la fonction de transfert qui lie les quantités épandues aux quantités parvenant au captage, mais également de la concentration C_0 admissible au niveau du captage, c'est-à-dire des exigences de qualité associée à la ressource en eau. Il est alors possible de déterminer un risque financier attaché à la contamination d'un captage (Cf. définition (I.38)):

$$\mathcal{R}_f(C_0) = \int_{C_0}^{+\infty} C_r(x) f_r(x) dx \quad (IV.2)$$

où $C_r(x)$ est le coût qu'entraîne la contamination d'un captage par une concentration x , $f_r(x)$ est la densité de probabilité associée au niveau de contamination x . On considère qu'une concentration inférieure à C_0 au niveau du captage n'entraîne aucun surcoût financier de la ressource en eau. Dans le cas où le coût financier $C_r(x)$ induit par la contamination du captage est indépendante de la valeur du niveau de contamination x , (IV.2) devient:

$$\mathcal{R}_f(C_0) = C_r(C_0)(1 - F_r(C_0)) \quad (IV.3)$$

Où $C_r(C_0)$ est le coût financier associé au dépassement de la concentration admissible au niveau du captage.

La méthodologie proposée dans ce mémoire permet la détermination de la fonction de transfert (Cf. relation I.21), qui lie les quantités épandues au niveau de contamination du captage par une relation du type:

$$C = f_T(Q_p) \quad (IV.4)$$

où C est la concentration au niveau du captage, Q_p est le taux d'épandage des produits phytosanitaires à la surface du sol (champ bidimensionnel) et f_T la fonction de transfert

associée. On peut alors déterminer le risque de contamination $\mathcal{R}_f(Q_p)$ associé à un certain taux d'épandage Q_p en produits phytosanitaires par la relation:

$$\mathcal{R}_f(Q_p) = C_r(C_0) \left[1 - F_r \left(f_T^{-1}(Q_p) \right) \right] \quad (IV.5)$$

Dans le cadre de l'analyse d'incertitude, les paramètres hydrologiques et physico-chimiques sont considérés comme des variables aléatoires; la fonction de transfert f_T devient elle-même une fonction aléatoire. Les effets de la variabilité spatiale des caractéristiques du sol et du sous-sol sont pris en compte par des méthodes de traitement statistique. Ces méthodes sont détaillées dans le paragraphe suivant.

IV-1.3. Méthodes de prise en compte de la variabilité spatiale et de l'incertitude sur les caractéristiques de sol: revue bibliographique.

IV-1.3.1. Principe et classification des méthodes

Caractérisation de la variabilité spatiale

Les différentes méthodes statistiques de caractérisation de la variabilité spatiale des sols s'appuient en général sur des hypothèses communes (Vauclin, 1982): considérant une propriété $\mathcal{P}(x)$ dépendant des coordonnées spatiales, tirée d'un ensemble de réalisations possibles:

- on considère que les variations effectivement observées de la propriété (qui concernent donc une réalisation particulière) couvrent la totalité des variations possibles de la population \mathcal{P} . Cette propriété est l'ergodicité;
- on suppose également, en général, que les processus sont stationnaires, d'ordre 2 au minimum (*i.e.* l'espérance mathématique $\bar{\mathcal{P}}$ de la propriété $\mathcal{P}(x)$ est indépendante de la coordonnée d'espace x , sa variance est finie et la fonction de covariance entre deux points ne dépend que de leurs positions respectives).

Ces hypothèses permettent d'introduire la notion de variogramme, qui déterminent la structure spatiale de la propriété \mathcal{P} . Lorsque de plus la fonction de covariance entre deux points ne dépend que de la distance qui les sépare et non de la direction, la propriété \mathcal{P} est dite isotrope.

Les méthodes actuellement connues d'analyse de la variabilité spatiale des sols sont de deux types (Vauclin, 1982):

- 1) les analyses statistiques qui ne tiennent pas compte de la structure spatiale des propriétés: les valeurs $\mathcal{P}(x_1)$ et $\mathcal{P}(x_2)$ de la propriété \mathcal{P} , mesurées en deux points différents x_1 et x_2 de l'espace, sont indépendantes. La description de la variable \mathcal{P} est alors ramenée à ses moments d'ordre 1 et 2;
- 2) celles qui prennent en compte cette structure (variables régionalisées): la propriété \mathcal{P} est décrite non seulement en termes de moments d'ordre 1 et 2, mais également par son variogramme. A noter qu'une propriété \mathcal{P} dont le variogramme a une portée nulle entre dans le cadre de 1).

Nous montrerons dans ce chapitre (§ IV-3.3) que la structure spatiale influe sur l'incertitude dans les résultats de calcul.

Traitement de la variabilité spatiale

Supposons que nous nous intéressions aux effets de la variabilité spatiale d'une propriété $\mathcal{P}(x)$ (par exemple la durée de vie d'un produit phytosanitaire dans la zone non saturée) - ou de plusieurs propriétés $\mathcal{P}_i(x)$ - sur une variable $Y(x)$ (exemple: quantité de produit arrivant à la nappe). Il existe deux grands types de méthode pour déduire la loi de distribution de Y : les méthodes aux perturbations et les méthodes de Monte Carlo.

- Les méthodes aux perturbations permettent de déduire les moments de Y à partir de ceux des propriétés \mathcal{P}_i et des dérivées partielles $\partial Y/\partial \mathcal{P}_i$ (ou $dY/d\mathcal{P}$ si Y ne dépend que d'une seule propriété \mathcal{P}). Ainsi, Loague et al. (1990) et Loague (1991) ont appliqué une analyse d'erreur du premier ordre à la détermination de la vulnérabilité des eaux souterraines (indice utilisé: AF) sur le bassin de Pearl Harbour (Hawaii). L'inconvénient de ce type de méthode est de n'être applicable que dans la mesure où les variations des propriétés \mathcal{P}_i déterminant la variable Y sont faibles (*i.e.* les valeurs des variables sont proches de la moyenne), afin que l'on puisse négliger les termes d'ordre supérieur à 2 dans les développements en série des perturbations. Lorsque la variabilité spatiale est forte et/ou quand les équations décrivant les phénomènes sont fortement non-linéaires cette méthode ne peut être utilisée.
- Dans ce dernier cas, on a recours aux méthodes de type Monte Carlo. Celles-ci consistent à générer un nombre fini de réalisations des paramètres $\mathcal{P}_i(x)$ et, pour chacune de ces réalisations, à calculer la valeur de la variable Y résultante. On détermine alors les propriétés de la variable Y par une statistique sur l'ensemble fini des réalisations ainsi générées. Cette approche présente, par rapport à la précédente, l'avantage de ne pas introduire de simplifications. En revanche, suivant le nombre de propriétés impliquées dans l'analyse d'incertitude, elle peut devenir coûteuse en temps de calcul.

En raison de la grande variabilité des caractéristiques de l'hydraulique et du transport dans le sol et le sous-sol, nous avons opté pour une démarche du type Monte Carlo. Cette démarche demande la génération, selon les lois probabilistes appropriées, d'un certain nombre de champs aléatoires de conductivités hydrauliques du sol de la nappe, etc. Le paragraphe suivant expose différentes méthodes de génération de ces champs.

IV-1.3.2. Génération de champs aléatoires: revue bibliographique

Définitions

On dit qu'une réalisation d'un champ est une *estimation* si, en tout point de l'espace, elle fournit une valeur unique de la propriété - accompagnée d'une certaine erreur, ou variance d'estimation. Ainsi, une opération de krigeage fournit une estimation, à partir de données disponibles en certains points, d'un champ spatial, en permettant d'évaluer la valeur et son erreur associée en tout point de ce champ.

Un groupe de réalisations de la propriété $\mathcal{P}(x)$ forment des *simulations* si chacune d'elles respecte les propriétés statistiques de la propriété simulée, et si toutes sont équiprobables. Les simulations sont des *exemples* de ce que peut être la population réelle $\mathcal{P}(x)$, dont aucun n'est plus probable que les autres.

Les simulations sont dites *conditionnelles* si, en un certain nombre de points x_k de l'espace, la propriété $\mathcal{P}(x_k)$ est la même dans toutes ces simulations. On réalise par exemple ces simulations conditionnelles lorsque l'on cherche à reconstituer un champ réel sur une région donnée, en connaissant la valeur de ce champ en certains points précis.

Notre objet étant la simulation des propriétés de l'hydraulique et du transport, nous ne mentionnerons par la suite que les méthodes de simulation.

Méthodes booléennes

Ces méthodes sont particulièrement bien adaptées à la génération de champs fortement discontinus (caractéristiques des milieux fissurés par exemple): elles consistent à générer, au sein d'un faciès donné, des objets de même forme, mais de positions, d'orientations et de dimensions différentes. Ces objets représentent un second faciès, dont les propriétés sont différentes du premier. Ces méthodes sont des outils de simulation, mais le conditionnement reste, à l'heure actuelle, entaché d'empirisme (de Marsily, 1993).

Méthodes à seuils

Le principe de ces méthodes est le suivant: dans un premier temps, on génère une réalisation d'une fonction aléatoire $F(x)$ continue. Puis, en chaque point de l'espace, suivant que la valeur

de cette variable $F(x)$ est supérieure à tel ou tel seuil donné, on considère que ce point appartient à tel ou tel faciès, dont les caractéristiques sont homogènes. Les seuils sont déterminés de façon à ce que le champ simulé restitue les quantités respectives des différents faciès présents dans la réalité. Ce type de simulation est plus aisément conditionnable que les méthodes booléennes (de Marsily, 1993) et il présente l'avantage de pouvoir faire apparaître les stratifications éventuelles dans les sols en jouant sur la structure spatiale de la fonction F . De Marsily (1993) mentionne également une méthode analogue (indicatrices de faciès), qui consiste à générer des fonctions aléatoires propres à chaque faciès et à adopter, pour chaque point de l'espace, le faciès dont la probabilité est la plus élevée. Cette méthode de simulation présente l'avantage, par rapport à la précédente, de prendre en compte une structure spatiale propre à chaque faciès.

Méthodes continues

Les méthodes mentionnées précédemment présentent l'avantage de prendre en compte des discontinuités dans les propriétés du sol et du sous-sol. En revanche, elles imposent souvent, pour restituer la complexité de la structure des champs simulés, d'adopter des maillages très fins, au-delà parfois des possibilités des outils de calcul actuels (4.10^{10} mailles pour la simulation de MacKay et Riley [1993]), et de prendre en compte la dimension verticale dans les simulations. Aussi est-on parfois amené à adopter une description continue du milieu: ce type de méthode fait appel à l'hypothèse qu'au sein d'une même entité (par exemple, une couche géologique, un type de sol bien défini), les propriétés peuvent être considérées comme relativement continues. Alors, le champ de la propriété $\mathcal{P}(x)$ peut être généré par des méthodes spectrales, du type méthode des bandes tournantes. Bien que l'hypothèse de la présence d'un seul faciès au sein d'une même formation géologique soit fortement discutable (de Marsily, 1993), c'est ce type de méthode que nous avons employé dans notre étude de la variabilité spatiale. En effet, le nombre de paramètres demandé par de telles méthodes est faible, et la mise en oeuvre en est relativement aisée.

IV-2. METHODOLOGIE ADOPTÉE

IV-2.1. Paramètres pris en compte

Des études sur les effets de la variabilité spatiale ont montré (Aboujaoudé, 1991) qu'une vingtaine de simulations par paramètre sont nécessaires pour obtenir la convergence statistique. Nous devons ici étudier les effets de la variabilité spatiale de paramètres de l'écoulement et du transport dans deux milieux différents: les zones saturée et non saturée du sol. Par conséquent, en supposant que les paramètres sont non corrélés, le nombre minimal de simulations nécessaires pour obtenir des statistiques non biaisées est $N_{sim} = 20^{2n}$, où n est le

nombre de paramètres pris en compte. Nous avons donc décidé de limiter l'étude à deux paramètres: la conductivité hydraulique (conductivité à saturation pour les calculs dans la zone non saturée) et la durée de vie du produit. Ainsi, toujours en supposant que ces paramètres sont non corrélés, on aboutit à $20^4 = 160000$ combinaisons en chaque point du maillage. Ainsi, les seuls calculs relatifs à la zone non saturée ont demandé deux mois, la moitié étant dévolue aux calculs hydrauliques. En effet, pour chaque nouvelle simulation du champ de perméabilité en aquifère, il faut effectuer un nouveau calcul d'écoulement avec le modèle MIKE SHE pour retrouver la position du toit de la nappe qui correspond à ce champ de perméabilité. La convergence de ces calculs, à partir d'un état initial de nappe arbitraire, est très longue (parfois plus d'une journée CPU sur une station de travail HP 735). Prendre en compte la variabilité d'un paramètre supplémentaire dans l'hydraulique ou le transport reviendrait à multiplier par 10 ou 20 la durée des simulations, délai incompatible avec le déroulement d'une thèse. C'est pourquoi nous nous sommes limités à l'influence des conductivités hydrauliques à saturation et des durées de vie dans les zones saturée et non saturée.

IV-2.2. Génération de champs aléatoires par la méthode des bandes tournantes

La méthode des bandes tournantes, introduite par Matheron (1973), a pour objet la génération d'un champ aléatoire de moyenne nulle, d'écart-type unitaire, suivant une loi normale (pour obtenir une loi de distribution différente, il suffit d'appliquer une transformation à la variable générée). Cette méthode génère un champ aléatoire bidimensionnel ou tridimensionnel en superposant des champs monodimensionnels générés sur des droites concourantes, d'orientations différentes (Cf. figure IV-1). La loi de distribution du processus bidimensionnel ou tridimensionnel à simuler permet de déterminer celle de ces processus unidimensionnels. Nous nous intéresserons par la suite à la génération de processus bidimensionnels. Par rapport à la classification établie dans le § IV-1.2.2., la méthode des bandes tournantes se classe parmi les méthodes de simulation non conditionnelle.

Les lignes sur lesquelles on génère les distributions unidimensionnelles ont la même origine O , arbitrairement choisie. Les vecteurs directeurs \vec{u}_j des lignes (j) ont une direction équiprobable dans le plan (*i.e.* l'angle θ_j de la bande j avec l'axe (Ox) suit une densité de probabilité uniforme sur $[0, 2\pi[$). Sur chacune de ces lignes, on génère une distribution unidimensionnelle $z_j(\xi_j)$ discrète, stationnaire, de moyenne nulle et de covariance fonction de la covariance du processus bidimensionnel à simuler. La valeur $X_j(x,y)$ de la variable en un point (x,y) du maillage est égale à la valeur $z_j(\xi_j(x,y))$, où $\xi_j(x,y)$ est la projection orthogonale, sur la droite j , du point (x,y) . La valeur finale de la variable $X(x,y)$ est la somme pondérée des valeurs $X_j(x,y)$ générées à partir des lignes j :

$$X(x,y) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=1}^L X_j(x,y) \quad (IV.6)$$

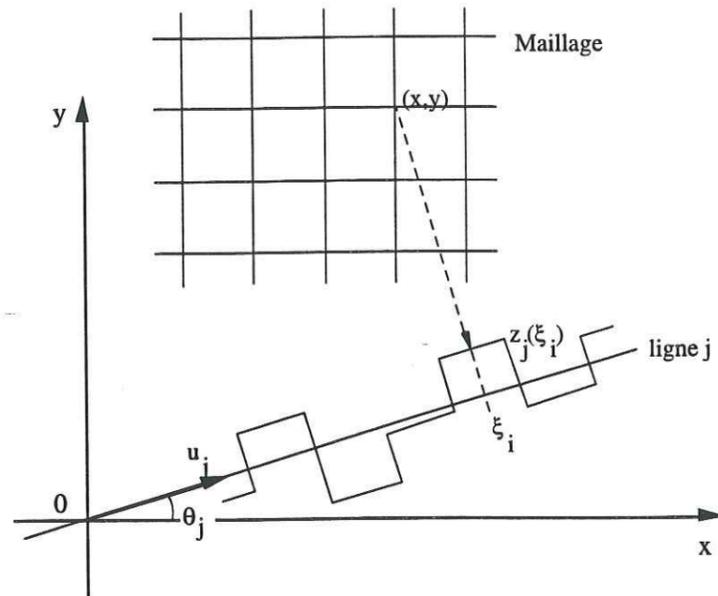


Figure IV-1: Génération d'une variable sur un maillage bidimensionnel à partir d'une distribution aléatoire sur une ligne (d'après Mantoglou et Wilson, 1982)

La valeur du processus unidimensionnel est donnée par:

$$z_j(\xi) = 2 \sum_{k=1}^M (S_1(\omega_k \Delta\omega)) \cos(\omega_k' \xi + \Phi_k) \quad (IV.7.a)$$

$$\omega_k = \left(k - \frac{1}{2}\right) \Delta\omega \quad (IV.7.b)$$

$$\omega_k' = \omega_k + \delta\omega \quad (IV.7.c)$$

où M est le nombre d'harmoniques considérés, S_1 la fonction de densité spectrale du processus unidimensionnel définie entre les fréquences $-\Omega$ et $+\Omega$, Φ_k un angle aléatoire suivant une distribution uniforme entre 0 et 2π , $\Delta\omega$ la fréquence de discrétisation ($\Delta\omega = \Omega/M$), et $\delta\omega$ une fréquence aléatoire introduite pour éviter les périodicités dans la distribution. Cette fréquence aléatoire est tirée dans une loi uniforme sur l'intervalle $[-\Delta\omega/2, +\Delta\omega/2]$, $\Delta\omega'$ étant petit par rapport à $\Delta\omega$. Shinozuka et Jan (1972) conseillent d'adopter $\Delta\omega' = \Delta\omega/20$.

L'expression de la fonction de densité spectrale du processus unidimensionnel est donnée par (Mantoglou et Wilson, 1982):

$$S_1(\omega) = \frac{\omega}{2} \int_0^{+\infty} \mathcal{C}(r) J_0(\omega r) r dr \quad (IV.8)$$

$\mathcal{C}(r)$ étant la fonction de corrélation du processus bidimensionnel, J_0 étant une fonction de Bessel de première espèce et d'ordre 0. En règle générale, sauf quelques cas particuliers, il n'est pas possible de trouver d'expression analytique de la fonction de densité spectrale unidimensionnelle pour une expression donnée de la covariance bidimensionnelle (Cf. Mantoglou et Wilson [1982], Munoz-Pardo [1987] pour ces solutions analytiques).

Afin de pouvoir simuler des champs de structures spatiales diverses, nous avons procédé à une intégration numérique de (IV.8). Ce développement a été intégré dans un générateur déjà existant, développé et validé par Aboujaoudé (1991).

Les portées des variogrammes mesurés pour la conductivité hydraulique en aquifère peuvent aller du kilomètre à la dizaine de kilomètres (Delhomme, 1979). Dans l'application qui nous occupe, la dizaine de kilomètres est supérieure aux dimensions du bassin sur lesquels nous générons les champs aléatoires: on assiste alors à l'apparition d'effets de bord dans la génération des champs par la méthode des bandes tournantes. Nous avons donc généré les champs sur un maillage dont les dimensions sont trois fois plus importantes que celles de notre modèle, puis nous avons conservé uniquement la partie centrale des champs générés, en vérifiant que les moments du processus sur ce maillage réduit étaient bien ceux désirés. La figure IV-2.a montre un exemple de champ aléatoire généré par cette méthode; la figure IV-2.b compare le variogramme théorique avec les variogrammes expérimentaux calculés sur deux champs générés. Le variogramme théorique est un variogramme linéaire à effet de pépite.

IV-2.3. Influence de la structure spatiale des champs

Un autre objet de ces travaux était d'étudier la sensibilité de l'incertitude sur les valeurs calculées par rapport à la structure spatiale des champs simulés, et ce pour deux raisons:

- nous ne disposons d'aucune information sur la structure spatiale des conductivités et des durées de vie sur le site du Vannetin. Nous ne pouvons que déterminer un ordre de grandeur approximatif des portées des variogrammes de ces paramètres, en nous fondant sur une étude bibliographique. Dans l'hypothèse toutefois où la structure spatiale du champ de perméabilité dans l'aquifère a une influence sur l'incertitude relative aux résultats obtenus, les études expérimentales deviennent nécessaires lorsqu'il s'agit d'appliquer la méthodologie à un site donné;

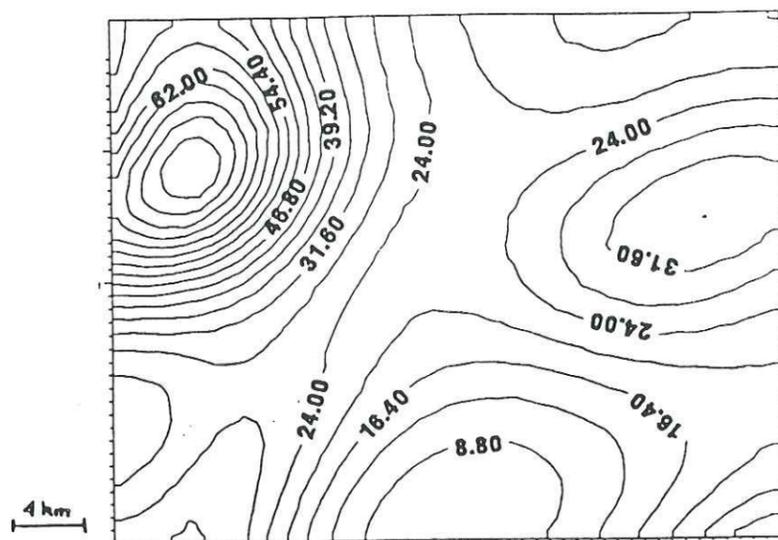


Figure IV-2.a: Champ bidimensionnel de conductivité hydraulique en aquifère (unité: 10^{-5} m.s^{-1}) généré par la méthode des bandes tournantes

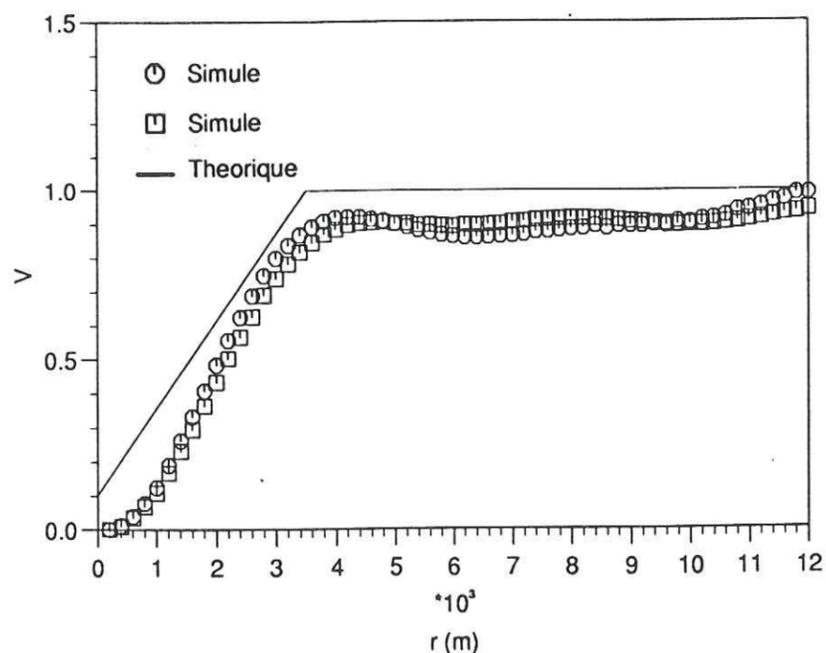


Figure IV-2.b: Variogrammes théorique et expérimentaux obtenus par la méthode des bandes tournantes

- de plus, dans le cas où l'incertitude sur les valeurs calculées est sensible à la structure spatiale des paramètres de l'hydraulique et du transport, il faudra, lors d'éventuelles campagnes de mesure, déterminer, en plus de leurs moments, les variogrammes de ces paramètres: ceci a des conséquences sur la conception des réseaux d'échantillonnage (Munoz-Pardo, 1987).

L'étude de l'influence de la variabilité spatiale a été menée comme suit:

- dans un premier temps, une simulation de Monte Carlo a été réalisée avec une portée donnée du variogramme des paramètres dans la zone saturée, et d'une portée de 10 mètres pour ceux de la zone non saturée. A l'échelle où nous travaillons (mailles de la quarantaine de mètres), les propriétés de la zone non saturée peuvent alors être considérées comme décorréélées spatialement;
- ensuite, des simulations de Monte Carlo du transport en aquifère ont été effectuées en faisant varier de manière indépendante les portées des variogrammes de la conductivité hydrauliques et de la durée de vie dans l'aquifère.

IV-3. DONNEES ET RESULTATS

IV-3.1. Données utilisées

IV-3.1.1. Propriétés de l'aquifère

La perméabilité moyenne de l'aquifère a été prise égale à celle obtenue par le réglage du modèle MIKE SHE. En admettant que la conductivité hydraulique en aquifère suit une loi log-normale (Freeze, 1975; Gelhar, 1976), l'écart-type du logarithme est de 0,48 pour l'aquifère de Champigny (Delhomme, 1979). La structure spatiale est également inconnue; nous avons utilisé des structures de variogrammes mentionnées dans la littérature. D'après Delhomme (1979), des distances de corrélation de 10 kilomètres ou davantage sont courantes dans les aquifères calcaires. Pour des études portant sur des distances de l'ordre de 10 kilomètres ou moins, Delhomme (1979) suggère l'emploi de variogrammes linéaires avec effet de pépite. Lorsque la distance horizontale dépasse les 10 km, l'emploi d'un double variogramme sphérique est conseillé.

Nous avons adopté pour la porosité de l'aquifère une valeur uniforme de 5%. Il ne faut pas perdre de vue qu'une porosité variable dans l'espace engendre une variabilité supplémentaire de la vitesse interstitielle, donc de la vitesse de convection des produits dans l'aquifère: négliger la variabilité de la porosité est donc un facteur limitant dans la présente analyse.

Ne disposant d'aucune indication sur la structure spatiale des propriétés de transport dans l'aquifère, nous avons, pour cette première partie de l'étude, fait l'hypothèse que la durée de vie suit une loi normale, de portée identique à celle du logarithme de la perméabilité. Nous avons supposé que ces deux variables étaient décorréélées. La valeur adoptée pour la durée de vie moyenne dans l'aquifère est de deux ans, avec un écart-type de six mois.

Comme mentionné au paragraphe IV-2.2., la génération de champ aléatoire par la méthode des bandes tournantes fait appel à la densité spectrale d'un processus unidimensionnel: nous avons obtenu cette densité spectrale par intégration numérique, avec la méthode des trapèzes, de l'équation (IV.8). Nous avons constaté expérimentalement qu'un pas d'intégration de $a/50$ (où a est la portée du variogramme linéaire) était suffisamment fin pour obtenir la convergence de l'intégrale.

IV-3.1.2. Propriétés de la zone non saturée

Les propriétés de l'hydraulique et du transport dans la zone non saturée sont mieux connues que dans la zone saturée du sol. Il est généralement admis que la distribution spatiale de la conductivité hydraulique à saturation obéit à une loi log-normale (Vauclin, 1982). Les études expérimentales (Luxmoore et al., 1981; Nielsen et al., 1973; Russo, 1983; Russo and Bresler, 1981; Sisson and Wierenga, 1981; Vieira, 1981; Sharma et al., 1980) ont montré que la distance de corrélation des logarithmes de conductivités hydrauliques à saturation est de l'ordre de la dizaine de mètres (de 0,13 m à 50 m), avec un écart-type de 0,6 en moyenne. A l'échelle où nous travaillons (taille de maille de 40 mètres), une telle structure spatiale se traduit par une décorrélation quasi-totale entre les propriétés d'une maille et celles de la maille voisine.

La variabilité des paramètres de transport dans la zone non saturée est assez bien connue. On admet en général que la loi de distribution de la durée de vie d'un produit donné dans la zone non saturée suit une loi symétrique (normale ou triangulaire) par rapport à une moyenne donnée: Carsel et al. (1988) utilisent une densité de probabilité triangulaire pour le taux de dégradation de l'aldicarbe; Loague et al. (1990) font appel, pour une étude de transport de l'atrazine dans les sols de Hawaï, à une loi normale (durée de vie moyenne: 20 jours, écart-type: 10 jours). En règle générale, quel que soit le produit étudié (aldicarbe pour Carsel et al., 1988; atrazine et diuron pour Loague et al., 1990), l'écart-type est égal au tiers ou à la moitié de la moyenne. Nous nous sommes conformés aux valeurs données par Loague et al. (1990).

IV-3.2. Incertitudes sur la pression de pollution admissible

IV-3.2.1. Concentration admissible dans la zone saturée

Les calculs de transport dans l'aquifère ont été, comme dans le chapitre précédent, effectués avec le logiciel ARGOS. Nous travaillons sur la combinaison de 20 champs de perméabilité et de 20 champs de durée de vie, la simulation de monte Carlo produit 400 champs de concentration admissible dans l'aquifère. Le traitement statistique de ces champs a été réalisé

de deux manières: d'une part, on a effectué un classement par déciles; d'autre part, on a calculé, en tout point du maillage, les moments de ces champs.

Les figures IV-3 et IV-4 montrent les premier et neuvième déciles du champ de concentration admissible en aquifère. Du fait de l'apparition de durées de vie et de vitesses faibles lors de la génération des champs de perméabilité et de durée de vie dans l'aquifère, le neuvième décile de la concentration admissible est très élevé, égal à la concentration de solubilité de l'atrazine sur presque tout le domaine d'étude.

Les figures IV-5 à IV-8 montrent les quatre premiers moments de la concentration admissible en aquifère. On remarquera notamment que le deuxième moment est supérieur d'un facteur 10 environ au premier. Cette importance de l'écart-type par rapport à la moyenne s'explique par la grande dispersion des concentrations admissibles, les écarts par rapport à la moyenne prenant, dans le calcul du deuxième moment, un poids d'autant plus important qu'ils sont plus élevés. Cette importance de l'écart-type confirme que l'emploi de l'analyse d'incertitude du premier ordre n'aurait pas été pertinent.

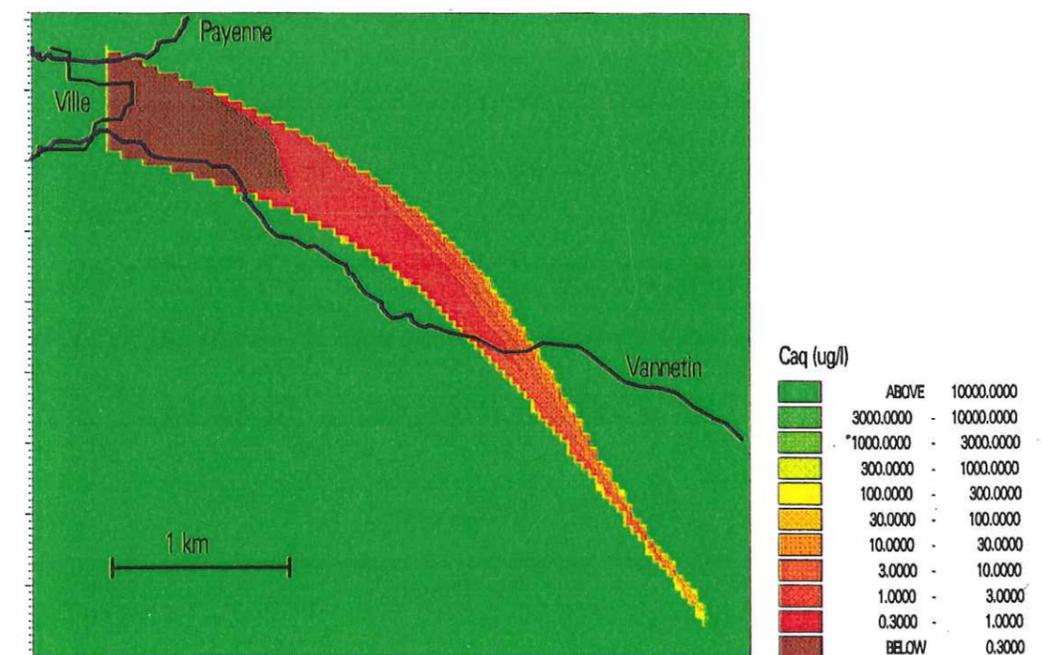


Figure IV-3: premier décile de la concentration admissible dans l'aquifère

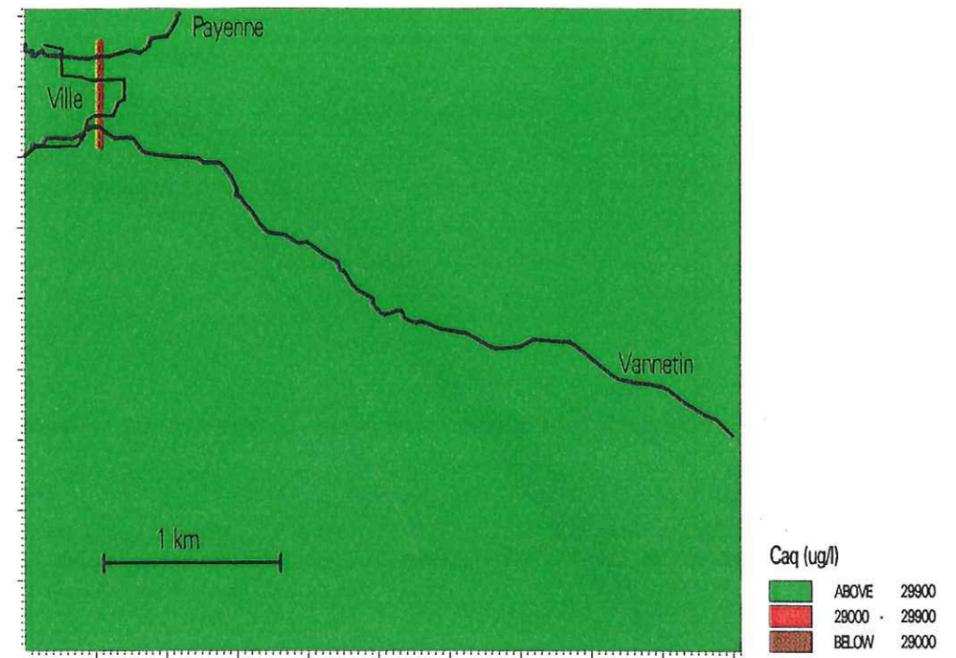


Figure IV-4: neuvième décile de la concentration admissible dans l'aquifère

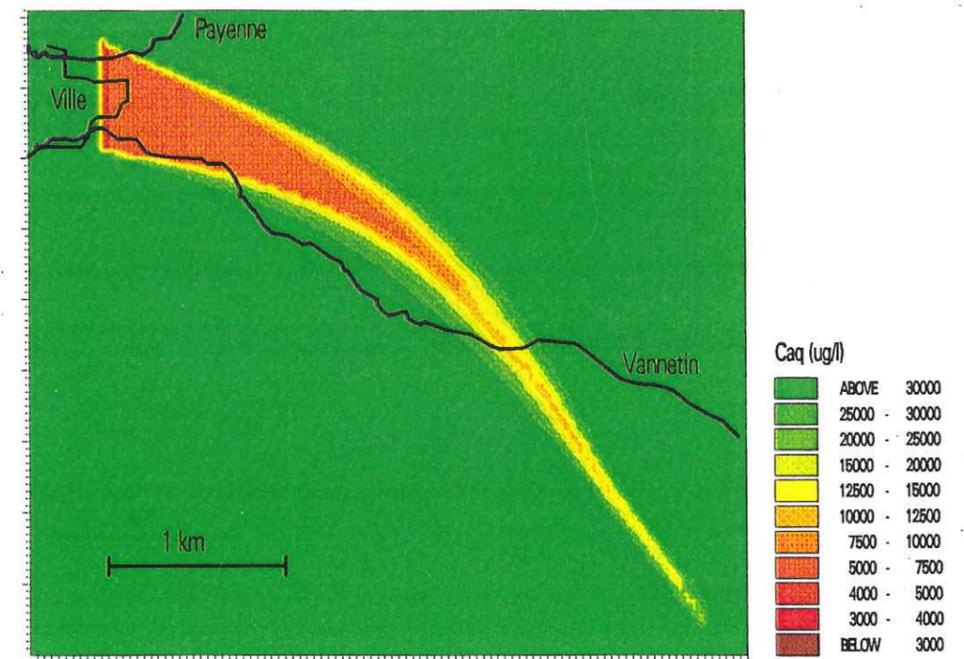


Figure IV-5: valeur moyenne de la concentration admissible dans l'aquifère

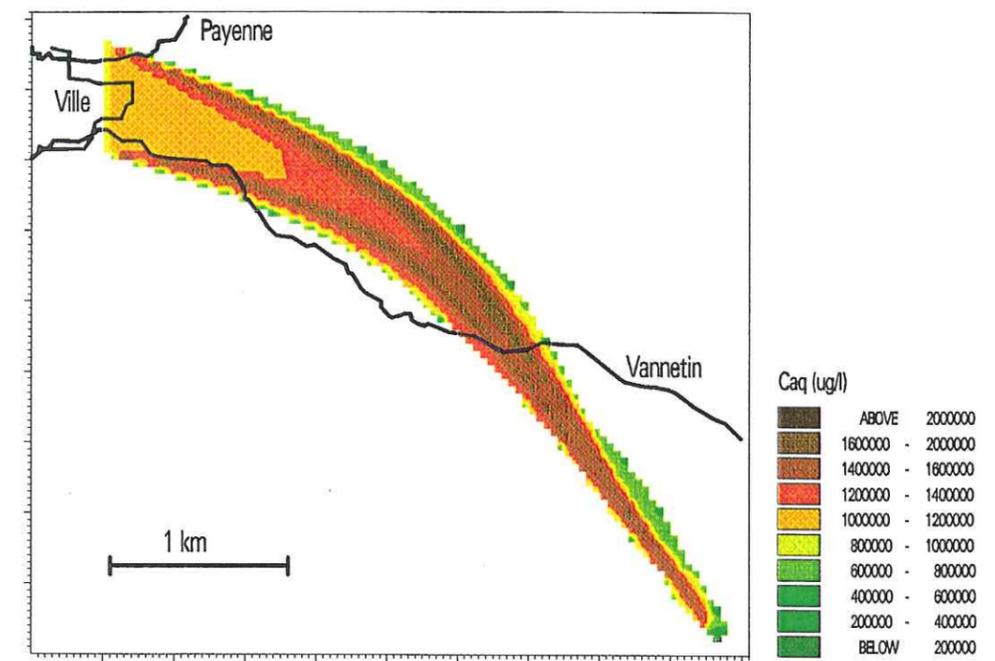


Figure IV-6: écart-type de la concentration admissible dans l'aquifère

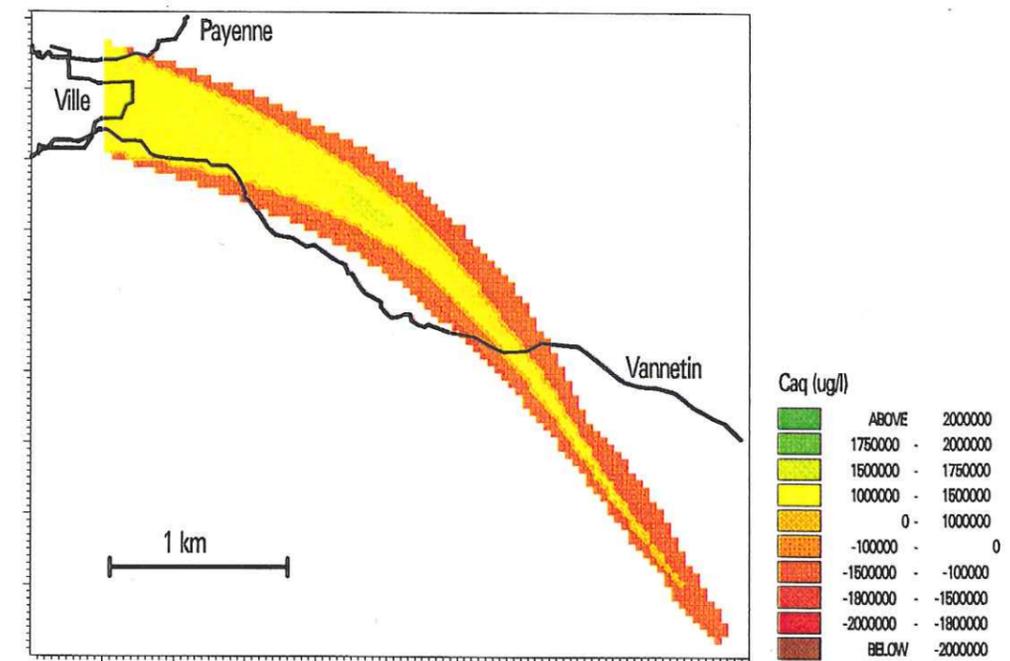


Figure IV-7: moment d'ordre 3 de la concentration admissible dans l'aquifère

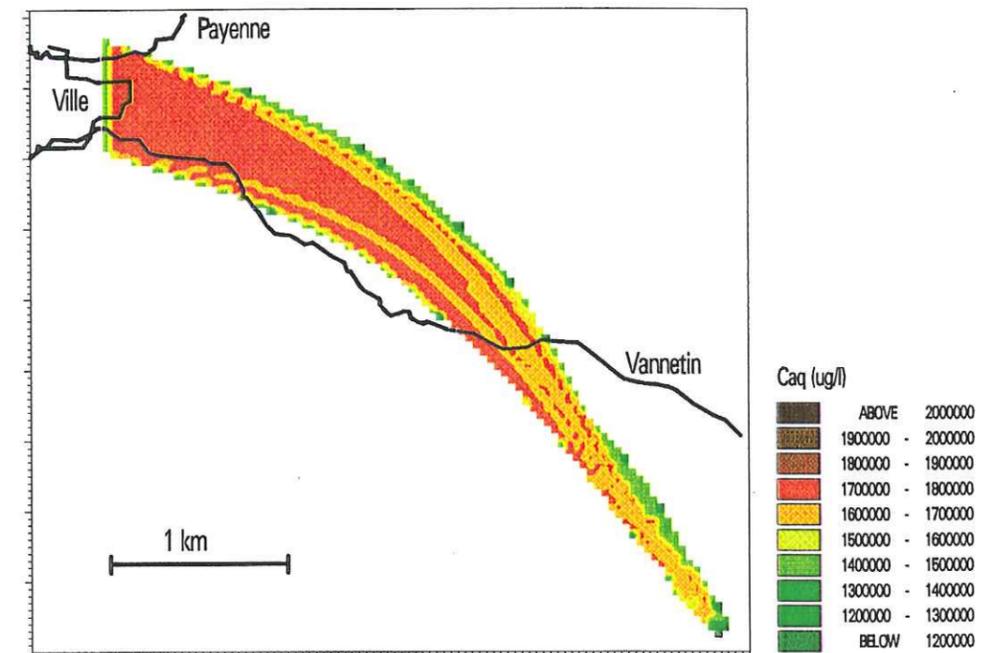


Figure IV-8: moment d'ordre 4 de la concentration admissible dans l'aquifère

IV-3.2.2. Pression de pollution admissible à la surface du sol

La pression de pollution admissible à la surface du sol a été déterminée à partir du champ de concentration admissible à la surface du sol, par le biais des calculs de transport dans la zone non saturée. On trouve dans cette opération la véritable justification des simplifications des calculs introduites au chapitre III (Cf. § III-4.). En effet, pour chaque point du maillage, et pour chaque valeur de la concentration admissible en aquifère (400 valeurs par point du maillage), il faut effectuer 400 simulations du transport dans la zone non saturée pour obtenir la distribution statistique de la pression de pollution admissible: on arrive à un nombre de 160000 simulations par maille et l'utilisation de la simplification devient nécessaire.

Nous avons utilisé pour cela la relation établie au chapitre II (Cf. § III-4.4.).

Les figures IV-9 et IV-10 montrent les premiers et neuvième décile de la pression de pollution admissible.

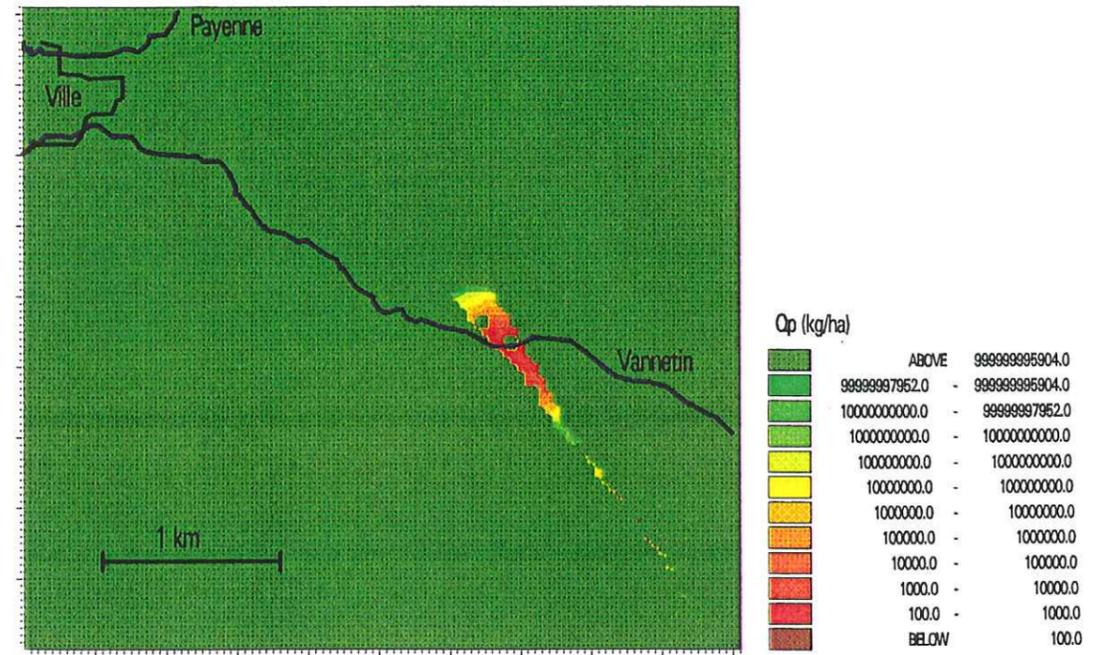


Figure IV-9: premier décile de la pression de pollution admissible

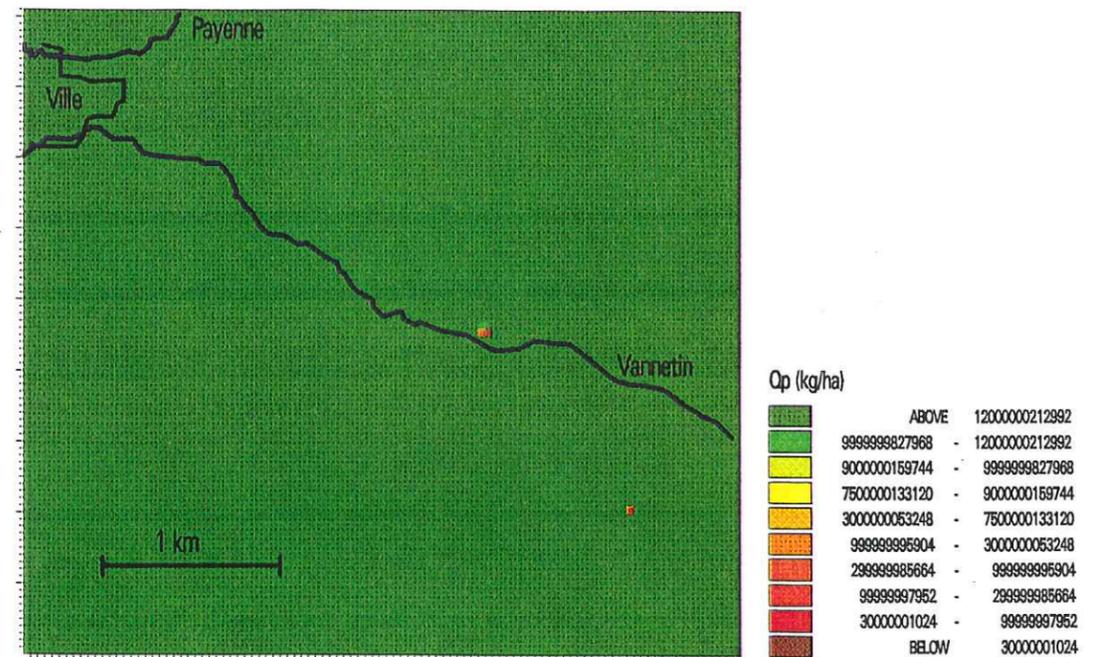


Figure IV-10: neuvième décile de la pression de pollution admissible

On peut formuler plusieurs conclusions:

- les premier et neuvième décile de la concentration admissible en aquifère différent de plusieurs ordres de grandeur. Pour le neuvième décile, la concentration admissible est en particulier égale à la limite de solubilité du produit sur la quasi-totalité du modèle. Le choix du niveau de protection du captage va donc fortement influencer sur la délimitation d'un périmètre de protection éventuel.
- la fonction de répartition des concentrations admissibles en aquifère n'obéit à une loi ni Gaussienne, ni symétrique. La figure IV-11 montre la loi de distribution empirique à laquelle obéit la concentration admissible en aquifère, pour un point donné du maillage. On remarquera en particulier la discontinuité de la fonction de répartition à la concentration de solubilité (ici 30 000 $\mu\text{g.l}^{-1}$).

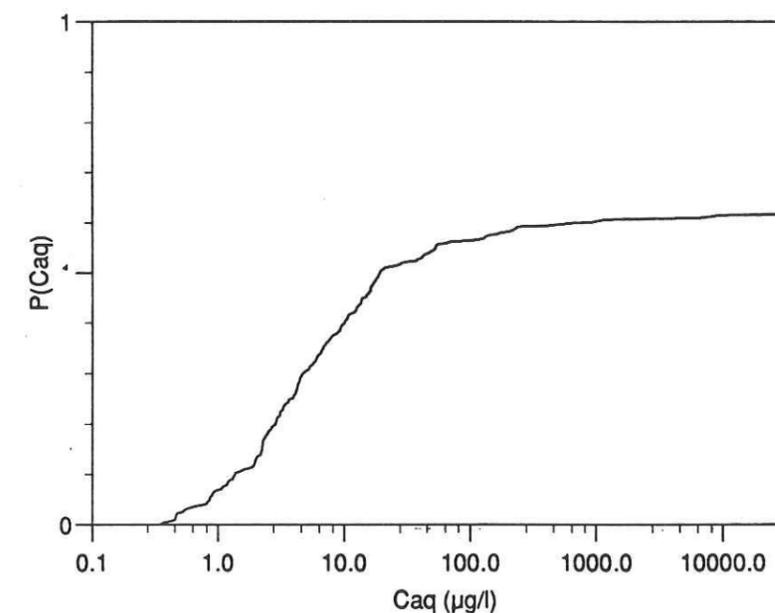


Figure IV-11: loi de distribution empirique de la concentration admissible en aquifère

- Etant donné l'importance des variations de la concentration admissible en aquifère en tous les points du maillage, on peut conclure rétrospectivement qu'une analyse d'incertitude du premier ordre n'aurait pas été pertinente dans le cas présent. La simulation de Monte Carlo, bien que lourde, était nécessaire. Cette conclusion rejoint celle de Ünlü (1994), qui, comparant les résultats d'une analyse d'incertitude données par la méthode de Monte Carlo, l'analyse d'incertitude du premier ordre et la méthode d'estimation ponctuelle, conclut à la supériorité de la première.

IV-3.3. Influence de la structure spatiale de l'aquifère

Pour examiner l'influence de la structure spatiale de l'aquifère sur l'incertitude de la concentration admissible en aquifère, nous avons combiné plusieurs hypothèses sur la corrélation des champs de perméabilité et de durée de vie dans l'aquifère. Pour chacun des champs, nous avons envisagé trois cas de figure:

- Champ corrélé à grande distance (portée du variogramme: 7500 m);
- Champ corrélé à moyenne distance (portée du variogramme: 3500 m);
- Champ décorrélié spatialement (portée du variogramme: 200 m);

Les autres propriétés statistiques (moyenne, écart-type) sont conservées d'une simulation à l'autre. En combinant ces cas de figure pour le champ de perméabilité et de durée de vie, on arrive à un total de neuf combinaisons. Pour chacune des combinaisons envisagées, l'écart proportionnel entre les premier et neuvième décile de la concentration admissible en aquifère:

$\log_{10} \left(\frac{Ca_{q90\%}}{Ca_{q10\%}} \right)$ a été cartographié (Cf. figures IV-12 à IV-20).

L'examen de ces figures permet de tirer trois conclusions:

- la structure spatiale des propriétés de transport et de l'hydraulique ont effectivement une influence sur l'incertitude de la concentration admissible en aquifère. Lors des mesures de terrain, on doit tenir compte de cette structure, en concevant des réseaux de mesure adaptés: il convient alors de déterminer non seulement les moments statistiques des propriétés de l'aquifère, mais également leurs variogrammes.
- La variabilité de la conductivité hydraulique dans l'aquifère a une influence plus grande sur les résultats que celle de la durée de vie (comparer les figures IV-13 et IV-16, qui sont établies pour une même portée de la durée de vie, et IV-15 et IV-16, afférentes à une même portée de la perméabilité). Ceci peut s'expliquer par le fait que l'amplitude relative des variations de la perméabilité est plus importante que celle de la durée de vie.

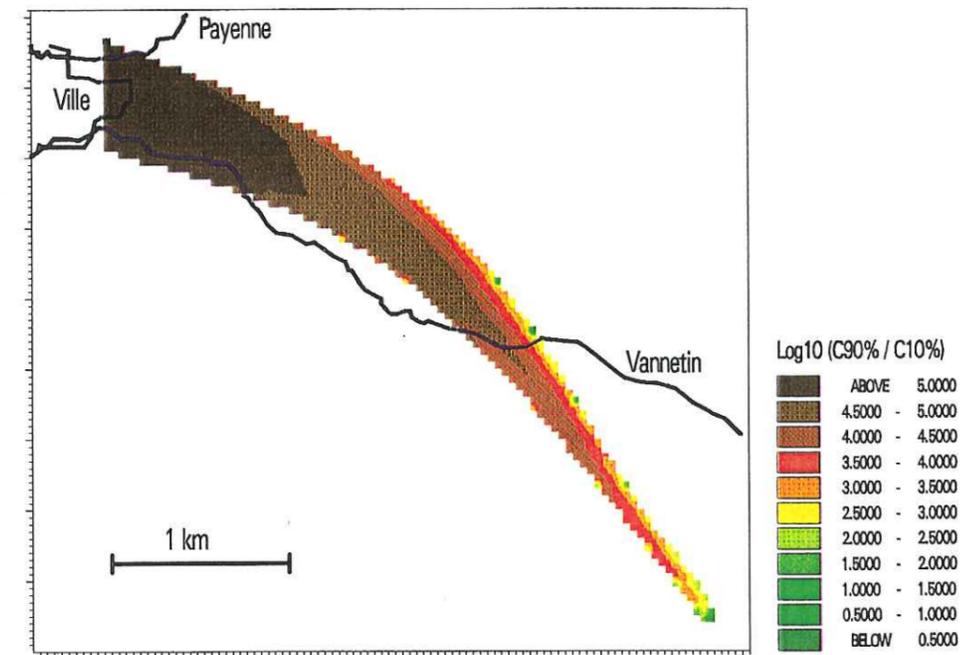


Figure IV-12: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 7500 m; et une portée de la durée de vie de 7500 m

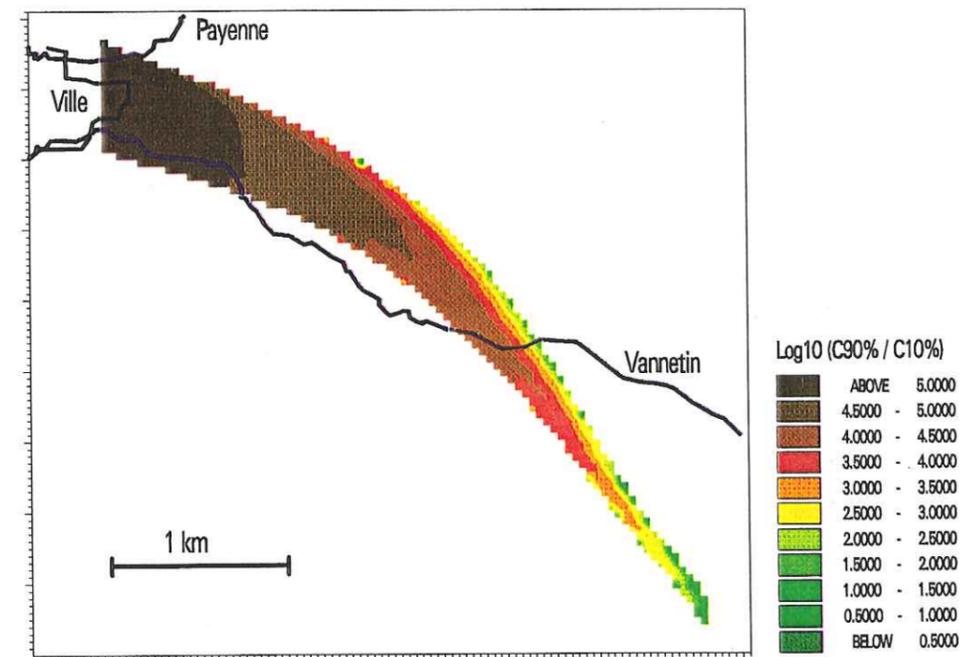


Figure IV-13: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 7500 m et une portée de la durée de vie de 3500 m

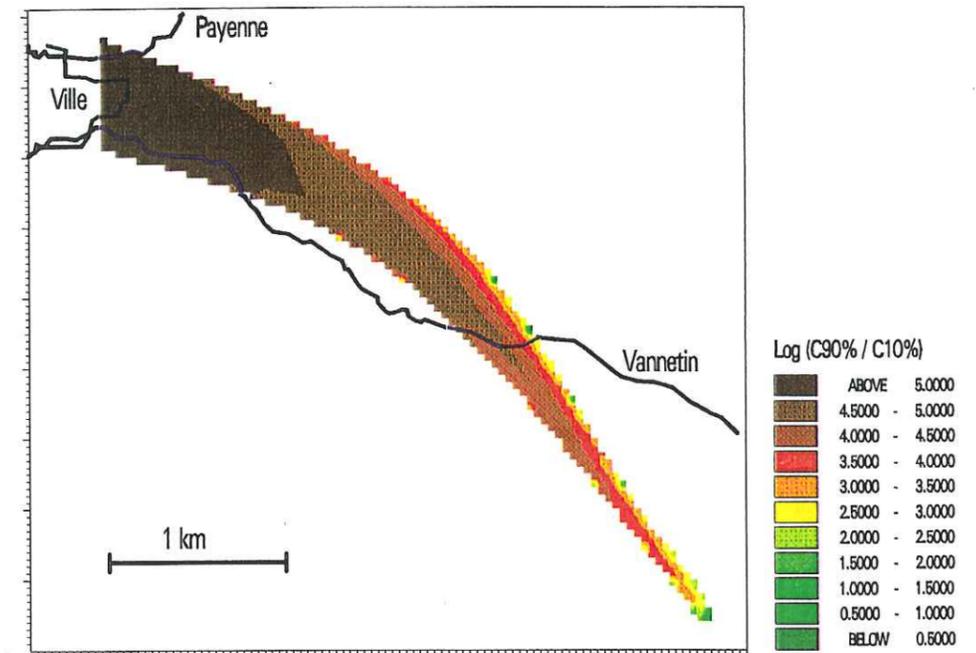


Figure IV-14: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 7500 m et une portée de la durée de vie de 200 m

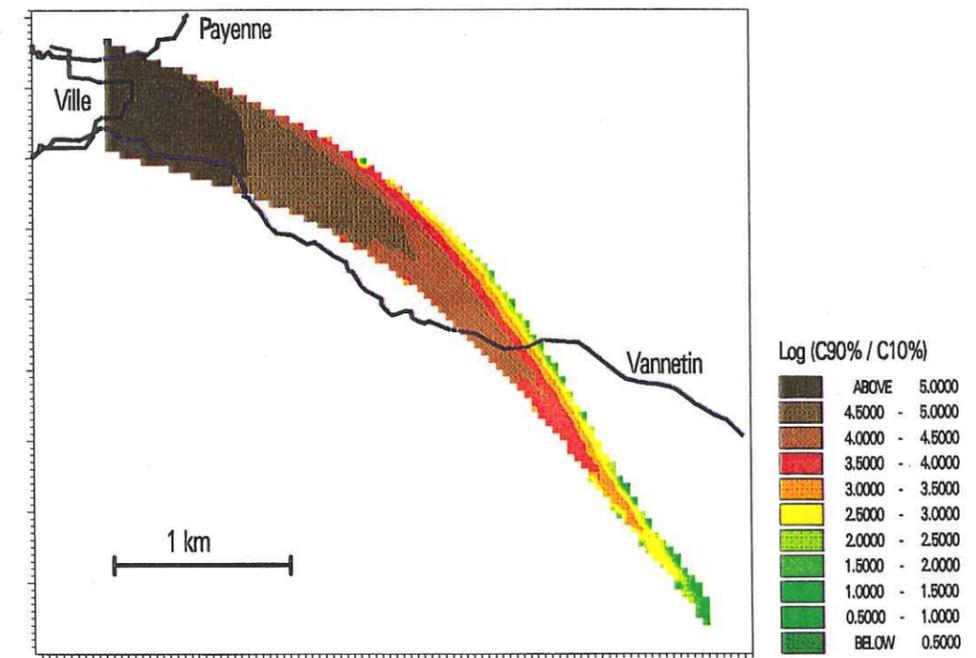


Figure IV-15: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 3500 m et une portée de la durée de vie de 7500 m

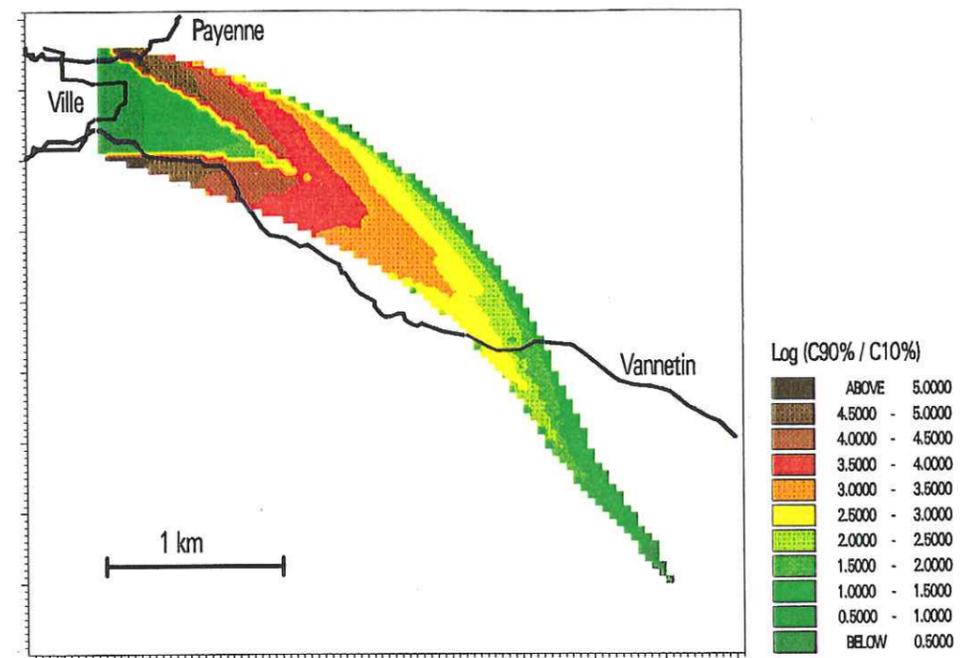


Figure IV-16: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 3500 m et une portée de la durée de vie de 3500 m

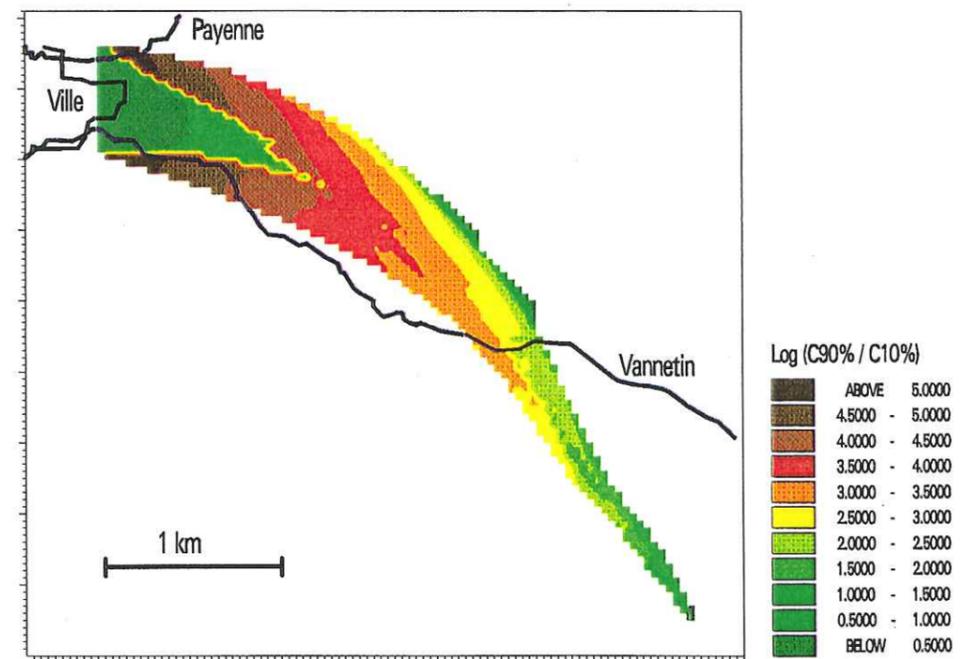


Figure IV-17: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 3500 m et une portée de la durée de vie de 200 m

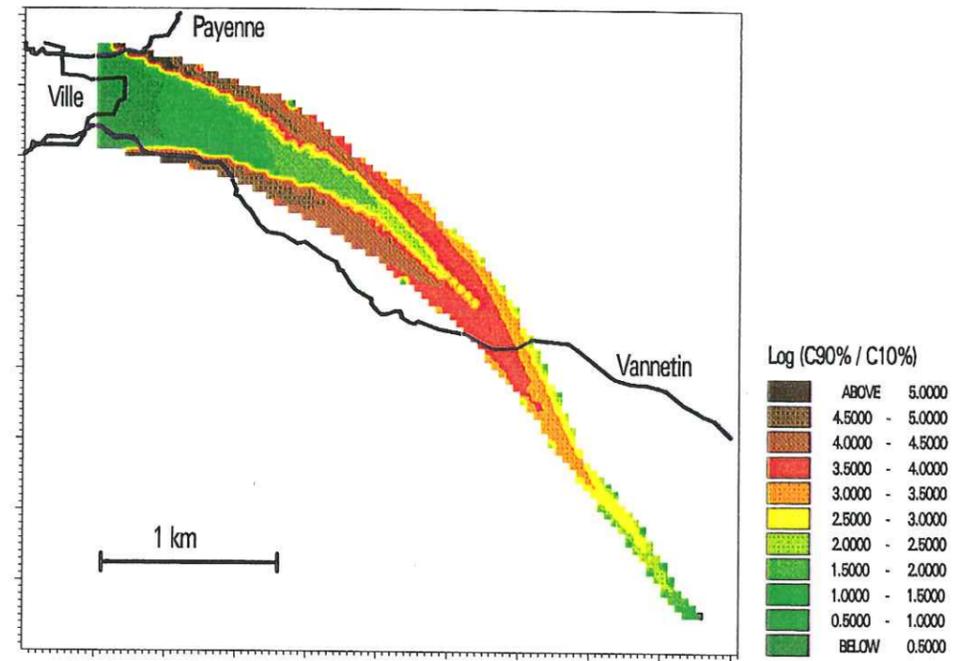


Figure IV-18: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 200 m et une portée de la durée de vie de 7500 m

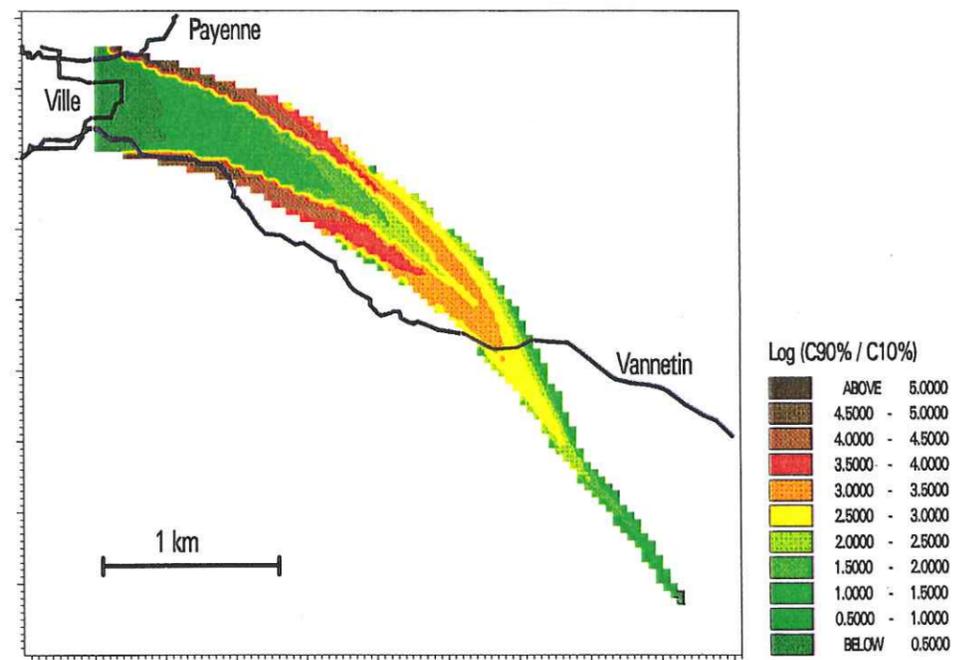


Figure IV-19: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 200 m et une portée de la durée de vie de 3500 m

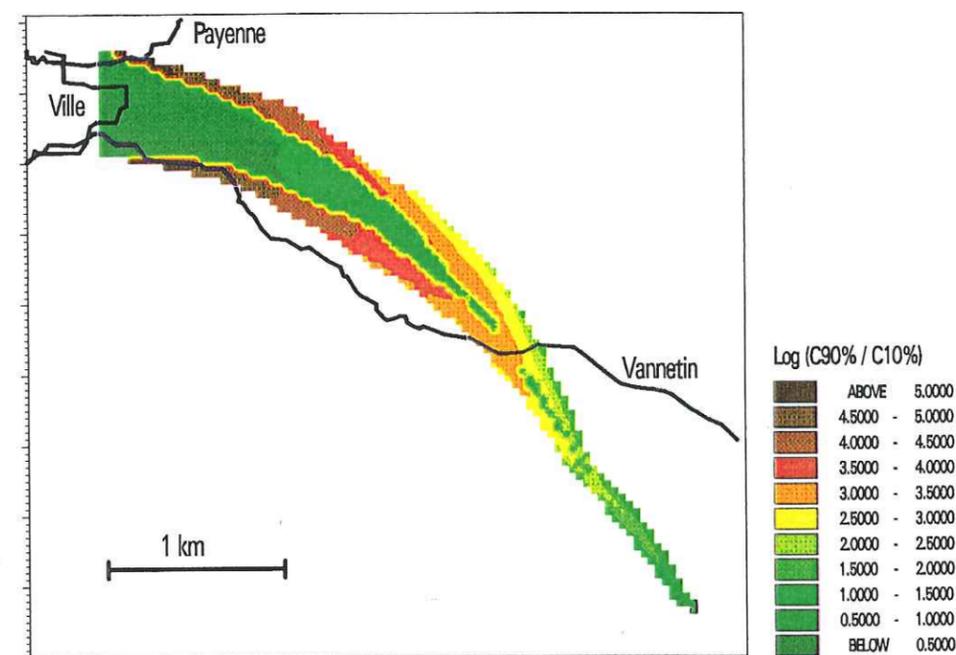


Figure IV-20: écart entre les premier et neuvième déciles de la concentration admissible en aquifère pour une portée de la perméabilité de 200 m et une portée de la durée de vie de 200 m

plus la distance de corrélation est grande, plus les résultats sont variables: ceci s'explique assez intuitivement par le fait qu'une propriété s'éloignant de sa moyenne le fait alors sur une distance d'autant plus importante que sa portée est plus élevée: l'écart entre les résultats de calcul est alors plus grand. Ceci implique qu'une sous-estimation des distances de corrélation (par exemple, du fait d'un réseau d'échantillonnage trop peu étendu en espace) des propriétés de l'aquifère conduit à sous-estimer la variabilité des résultats, donc à sous-estimer les concentrations admissibles des déciles élevés (niveau de protection faible du captage) - ce qui va dans le sens de la sécurité - et à surestimer les concentrations admissibles dans les déciles faibles (captage plus fragile, avec haut niveau de protection) - ce qui, au contraire, est handicapant.

IV-4. CONCLUSIONS

Nous avons examiné dans ce chapitre l'influence de la variabilité spatiale des caractéristiques du sol et de l'aquifère sur l'incertitude associée aux concentrations admissibles en aquifère et à la pression de pollution admissible en surface. Les résultats montrent une sensibilité importante des quantités calculées aux caractéristiques hydrodynamiques et du transport, dans l'aquifère comme dans la zone non saturée. La comparaison des figures II-5 et IV-13

montre que la moyenne des concentrations admissibles obtenues avec un champ aléatoire de perméabilité est fortement différente de la concentration obtenue avec une valeur moyenne de ce même champ de perméabilité. *On ne peut donc se contenter de fournir aux décideurs et aux exploitants des cartes de pression de pollution admissible déterminées à partir de valeurs moyennes des paramètres de l'hydraulique et du transport*: il est indispensable d'associer à ces cartes un niveau de protection du captage, par le biais de l'analyse de risque de contamination, comme exposé au paragraphe IV.1.2.

Au niveau de la caractérisation des paramètres hydrodynamiques et de transport, un effort important doit être fait sur l'acquisition des données: il s'agit non seulement de déterminer les propriétés statistiques des paramètres, mais également leur *structure spatiale*. Ce constat a des conséquences sur la conception des réseaux d'échantillonnage, dans le sens où une sous-estimation de la cohérence spatiale conduit à sous-évaluer le niveau de protection des captages fragiles ou sensibles, pour lesquels on désire un haut niveau de protection. On remarquera que la détermination du niveau de protection du captage n'est pas du ressort de nos travaux: ce niveau doit tenir compte en effet de contraintes économiques, sociales, politiques (analyse de risque financier, par le biais de la détermination du "coût" de l'abandon, momentané ou définitif, d'un captage en cas de contamination, etc...).

Signalons enfin que les résultats obtenus ici proviennent de modélisations des processus hydrologiques et du transport des produits phytosanitaires. Un modèle n'étant pas nécessairement la réalité, les résultats obtenus sont discutables dans le sens où ils ne sont pas validés par des expérimentations ou des observations directes. En revanche, ils peuvent conduire à attirer l'attention des organismes concernés par la définition des périmètres de protection des captages (bureaux d'études, agronomes), sur l'importance des divers mécanismes intervenant dans le devenir des produits phytosanitaires (couplage entre zones saturée et non saturée, variabilité spatiale et incertitude sur les caractéristiques du milieu naturel).

Univ. J. Fourier - O.S.U.G.
MAISON DES GEOSCIENCES
DOCUMENTATION
F. 38041 GRENOBLE CEDEX
Tél. 04 76 89 54 27 - Fax 04 76 51 40 58
Mail: platour@ujf-grenoble.fr

19 AOÛT 2003

V - CONCLUSION GENERALE

Les présents travaux ont porté sur une méthodologie d'utilisation de systèmes de modélisation en vue de la protection des captages d'eau potable en aquifère par rapport à la contamination par les produits phytosanitaires. Ces travaux ont pour but d'aider à la définition de pratiques agricoles plus respectueuses des objectifs de qualité de la ressource en eau souterraine.

Dans un premier temps, nous avons présenté les approches les plus employées au niveau de la modélisation du devenir des produits phytosanitaires, en rappelant les problèmes auxquels se heurte la modélisation prédictive (manque de données sur les états initiaux des systèmes à modéliser, sur l'historique d'utilisation des produits phytosanitaires). Le meilleur emploi des outils de modélisation nous semble donc être l'utilisation à des fins de *prévention*.

La notion de prévention fait référence à la notion de risque de contamination de la ressource en eau. Diverses méthodes d'estimation du risque de contamination de la ressource en eau sont rencontrées. En particulier, la notion de vulnérabilité, qui reflète la sensibilité de la ressource en eau à une contamination unitaire, est actuellement la notion la plus répandue. Cependant, cette notion connaît peu d'applications pratiques, car elle ne donne aucune indication pratique sur les pratiques culturales à adopter; en outre, elle néglige bien souvent une composante des phénomènes de transport (dans les aquifères ou dans la zone non saturée du sol). Nous avons donc été conduit à développer une méthodologie fondée sur la simulation du devenir des produits phytosanitaires en milieu souterrain.

L'étape préalable et indispensable aux calculs de transport des produits phytosanitaires en milieu souterrain était la définition du champ des vitesses dans l'aquifère considéré et de la position du toit de cet aquifère. Nous avons donc fait appel à une modélisation hydrologique du site-test, à l'aide du logiciel MIKE SHE. En raison de la quantité de données nécessaires à la modélisation par MIKE SHE, de nombreux paramètres ont dû être estimés par divers réglages.

Les critères de réglage d'un modèle hydrologique sont de deux natures: les critères de bilan, qui traduisent un comportement "moyen" du bassin modélisé (exemple: débit annuel moyen) et les critères dynamiques, qui traduisent la réponse du système à des sollicitations

transitoires. L'application de ces critères à deux sites (bassin du Grand Morin et bassin du Vannetin) montre que la pertinence de ces critères dépend de la morphologie du bassin.

La validation du modèle hydrologique du bassin du Grand Morin se heurte à l'insuffisance des données disponibles, à la non-pertinence du critère de validation adopté, ainsi qu'à l'impossibilité de représenter dans le modèle certains phénomènes physiques. On constate en effet que les débits en rivière ne sont pas un critère pertinent pour la validation de ce modèle. On met également en évidence la sensibilité du modèle aux conditions initiales de la simulation (inconnues dans notre cas). Le temps de réaction du modèle étant de l'ordre de plusieurs dizaines d'années, les opérations de validation et de calage se heurtent également au problème des périodes de modélisation représentatives: à partir du moment où la période de simulation est plus courte que la durée d'influence des conditions initiales (système à "mémoire longue"), l'incertitude sur ces conditions initiales devient un facteur invalidant pour le réglage et la validation du modèle. Enfin, l'incapacité du modèle actuel à simuler le ruissellement par remontée de la nappe (ruissellement de Dunne) permet d'expliquer la mauvaise qualité des simulations de débit en rivière.

A la lumière de cette expérience de modélisation, une réflexion a été menée sur la nature et les méthodologies de la validation des modèles hydrologiques. Bien que les modèles hydrologiques que nous avons construits ne soient que très partiellement validés, ils peuvent apporter des éléments de réponse sur les mécanismes de transfert hydrologique à l'échelle du bassin versant.

La méthodologie alternative exposée dans ce mémoire est abordée au troisième chapitre. Fondée sur une décomposition inverse des phénomènes de transport des produits phytosanitaires en milieu souterrain, elle permet notamment de relier la concentration admissible au niveau du captage, aux quantités de produit épandu à la surface du sol. Elle fait appel au calcul inverse, par la *méthode des caractéristiques*, du transport et de la dégradation des produits dans l'aquifère, ainsi que des calculs directs de transport des produits phytosanitaires dans la zone non saturée du sol.

Au niveau de la simulation du transport dans la zone non saturée, cette méthode est très coûteuse en temps de calcul. Une méthodologie de simplification a donc été mise au point: on montre, par le biais d'une *analyse harmonique*, que les termes transitoires des flux en produits phytosanitaires dans la zone non saturée décroissent lorsque la distance à la surface du sol augmente. Lorsque l'on fait l'hypothèse d'une cinétique de dégradation linéaire des produits, la décroissance de ces flux peut être raisonnablement approchée par une loi

exponentielle. Ce résultat justifie l'emploi d'un *indice de vulnérabilité* comme AF (*Attenuation Factor*, Rao et al., 1985), fondé sur les mêmes hypothèses physiques. L'étude théorique a été validée numériquement par des simulations à long terme (sur 20 ans) du transfert des produits dans la zone non saturée.

La méthodologie a été appliquée à un site-test, le bassin du Vannetin, un sous-bassin du Grand Morin, qui contribue à l'alimentation en eau de la région parisienne. Pour un produit phytosanitaire donné, l'atrazine, on a dressé la carte de pression de pollution admissible à la surface du sol, en appliquant la simplification des calculs de transport dans la zone non saturée.

Enfin, la dernière partie de nos travaux a consisté en une analyse d'incertitude sur les paramètres de l'hydraulique et du transport du site-test, avec prise en compte de la variabilité spatiale.

Le principe de l'analyse d'incertitude rejoint celui de l'analyse de risque de contamination, évoqué dans le premier chapitre de ce mémoire. Nous nous sommes intéressés à l'influence de l'incertitude attachée aux caractéristiques du sol et du sous-sol sur les résultats de simulation, mais également à l'influence de la structure spatiale de ces caractéristiques. En nous limitant à l'influence des perméabilités et de la durée de vie des produits dans les zones saturée et non saturée du sol, nous avons mis en évidence une grande sensibilité des résultats de calcul, non seulement à l'incertitude sur les paramètres, mais également à la structure spatiale des champs considérés. Une corrélation spatiale importante induit une augmentation de l'incertitude sur la pression de pollution admissible. En particulier, la pression de pollution admissible correspondant à un risque élevé est plus faible.

Ceci implique que, lors de la mesure des propriétés de l'aquifère, les réseaux d'échantillonnage doivent être conçus de manière à pouvoir déterminer correctement la structure spatiale de ces propriétés; une sous-estimation de la distance de corrélation conduisant à une sous-estimation du risque de contamination.

A ce stade de nos travaux, nous sommes en mesure de proposer des axes ultérieurs de recherche:

- la modélisation utilisée dans ce mémoire souffre de plusieurs limitations, décrites dans le chapitre II (cf. § II-5.3.). L'insuffisance qui nous paraît la plus limitante à l'heure

actuelle est la non prise en compte de la saisonnalité du comportement des sols (modification du comportement hydraulique en saisons sèche et humide). L'état actuel du logiciel MIKE SHE ne permet pas de reproduire cette saisonnalité; toutefois, la simulation de ce comportement est envisagée lors d'études ultérieures que l'auteur sera amené à effectuer au LHF;

les calculs de transport de produits phytosanitaires dans la zone non saturée du sol ont été effectués en partant de l'hypothèse d'écoulements et de transferts verticaux. Or, des études d'infiltration en présence d'accidents de la microtopographie (Aboujaoudé, 1991) ont montré une grande sensibilité des flux d'infiltration aux accidents du terrain. Des études montrent (Schmitz, 1993.a,b) qu'il est possible de modéliser l'infiltration dans les sillons de labours à partir d'une configuration unidimensionnelle, en tenant compte toutefois de la courbure de la topographie. Des travaux analogues pourraient être entrepris pour les phénomènes de transport des produits phytosanitaires;

nous regrettons de n'avoir pas pu valider les résultats des calculs de transport des produits phytosanitaires dans les zones saturée et non saturée du sol: faute de données expérimentales, une telle validation n'a pu être entreprise. Cette validation serait cependant une étape nécessaire dans l'application de la présente méthodologie.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Abbott, M.B.; Bathurst, J.C.; Cunge, J.A.; O'Connell, P.E. and Rasmussen, J. (1986). An Introduction to the European Hydrological System - Système Hydrologique Européen, "SHE", 1: History and Philosophy of a Physically-Based, Distributed Modelling System. *Journal of Hydrology*, 17 ; 45-59.
- Abbott, M.B.; Bathurst, J.C.; Cunge, J.A.; O'Connell, P.E. and Rasmussen, J. (1986). An Introduction to the European Hydrological System - Système Hydrologique Européen, "SHE", 2: Structure of a Physically-Based, Distributed Modelling System. *Journal of Hydrology*, 17 ; 45-59.
- Aboujaoudé, A. (1991). Modélisation hydrologique de l'infiltration dans les sols encroûtés à différentes échelles spatiales. *Thèse de Doctorat de l'Université Joseph Fourier (UJF) - Grenoble I*.
- Adams, E.E. and Gelhar, L.W. (1992). Field study of dispersion in a heterogeneous aquifer : 2 - Spatial moments analysis. *Water Resources Research*, Vol. 28, N° 2 ; 3293-3307.
- Agence Financière de Bassin Seine-Normandie (1972). Carte de l'évapotranspiration potentielle moyenne mensuelle au 1/25000e, courbes équidistantes de 50 mm.
- Albinet, M. et Margat, J. (1970). Cartographie de la vulnérabilité à la contamination des nappes d'eau souterraine. *Bull. BRGM* 2,3,4, 13-22.
- Aller, L., Bennett, T., Lehr, J. and Petty, R. (1985). DRASTIC: a standardized system for evaluating groundwater pollution potential using hydrogeologic settings. *USEPA Office of Research and Development, Washington, D.C.*, 384 p.
- Andersen, L.J. and Gorsk, E. (1987). Applicability of vulnerability maps. *Proc. Int. Conf. "Vulnerability of soil and groundwater to contaminants; R.I.V.M. Proc. and Inf.*, 38, 321-332.
- Averjanov, S.F. (1950). About permeability of subsurface soils in case of incomplete saturation. *Eng. Collect.*, 7.
- Bachmat, Y. and Collins, M. (1987). Mapping to assess ground water vulnerability to contamination. *Proc. int. conf. "Vulnerability of soil and groundwater to contaminants" ; RIVM proc. and Inf;* 38, 297-307.
- Bear, J. (1972). *Hydraulics of groundwater. Mc Graw-Hill.*
- Bear, J. and Verruijt, A. (1987). *Modeling Groundwater Flow and Pollution. D. Reidel Publisher, Dordrecht, Hollande.*
- Beck, M.B. (1987). Water quality modeling: a review of the analysis of uncertainty. *Wat. Res. Res.*, vol. 23, n°8; 1393-1442.
- Beretta, G.P.; Fumagalli, L.; Gabbani, G.; Gargini, G. and Pranzini, G. (1993). Vulnerability of the groundwater resources in the Pistoia plain (Tuscany, Italy): a preliminary investigation using the herbicide 2,4 D. *Proc. in IX Symposium Pesticide Chemistry : Mobility and degradation of xenobiotics; Piacenza, 11-13 Oct. 1993 ;* 587-631.

- Boesten, J.J.T.I. (1987.a).** Leaching of Herbicides to Ground Water : a Review of Important Factors and of Available Measurements. *1987 British Crop Protection Conference - Weeds*; 559-568.
- Boesten, J.J.T.I. (1987.b).** Modelling Pesticide Transport with a Three-Site Sorption Sub-Model: A Field Test. *Netherlands Journal of Agricultural Science*, 35 ; 315-324.
- Boesten, J.J.T.I. (1991).** Sensitivity Analysis of a Mathematical Model for Pesticide Leaching to Groundwater. *Pesticide Science*, 31 ; 375-388.
- Boesten, J.J.T.I. and Van der Linden, A.M.A. (1991).** Modeling the Influence of Sorption and Transformation on Pesticide Leaching and Persistence. *Journal of Environmental Quality*, 20 (2) ; 425-435.
- Boesten, J.J.T.I. and Van der Pas, L.J.T. (1988).** Modeling Adsorption/Desorption Kinetics of Pesticides in a Soil Suspension. *Soil Science*, 146 (4) ; 221-231.
- Boesten, J.J.T.I. ; Van der Pas, L.J.T. and Smelt, J.H. (1989).** Field Test of a Mathematical Model for Non-Equilibrium Transport of Pesticides in Soil. *Pesticide Science*, 25 ; 187-203.
- Boggs, J.M.; Young, S.C.; Beard, L.M. ; Gelhar, L.W.; Rehfeldt, K.R. and Adams, E.E. (1992).** Field study of dispersion in a heterogeneous aquifer. Overview and site description. *Water Resources Research*, Vol. 28, N° 12 ; 3281-3291.
- Bresler, E. and Dagan, G. (1979).** Solute dispersion in unsaturated heterogeneous soils at field scale. II-Applications. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 43; 467-472.
- Bresler, E. and Dagan, G. (1981).** Convective and pore scale dispersive solute transport in unsaturated soil conditions. *Water Resource Research*, 17; 1683-1693.
- Bresler, E. and Dagan, G. (1983).** Unsaturated flow in spatially variable field. 3-Solute transport models and their application in two fields. *Wat. Res. Res.*, 19; 429-435.
- BRGM (1994).** Situation hydrologique et prévisions de basses eaux. *Bulletin n° 53; mars 1994.*
- Brusseau, M.L. (1991).** Application of a Multiprocess Nonequilibrium Sorption Model to Solute Transport in a Stratified Porous Medium. *Water Resources Research*, 27-4 ; 589-595.
- Brusseau, M.L. ; Larsen, T. and Christensen, T.H. (1991).** Rate-Limited Sorption and Nonequilibrium Transport of Organic Chemicals in Low Organic Carbon Aquifer Materials. *Water Resources Research*, 27, 6 ; 1137-1145.
- Brusseau, M.L. ; Jessup, R.E. and Rao, P.S. (1992).** Modeling Solute Transport Influenced by Multiprocess Nonequilibrium and Transformation Reactions. *Water Resources Research*, 28-1 ; 175-182.
- BURGEAP (1993).** Géologie et hydrogéologie du bassin versant du Grand Morin (77). *Rapport R.1299-A.3061/392033.*
- Calderbank, A. (1989).** The occurrence and significance of bound residues in soils. *Reviews of Environmental Contamination and Toxicology*, Vol. 108 ; 71-103.
- Calvet, R. (1977).** Les herbicides et le sol. *ACTA*

- Calvet, R. ; Tercé, M. et Arvieu, J.C. (1980).** Mise au point bibliographique. Adsorption des pesticides par les sols et leurs constituants. III-Caractéristiques générales de l'adsorption des pesticides. *Ann. Agron.*, 31 (3) , 239-257.
- Carsel, R.F.; Parrish, R.S.; Jones, R.L.; Hansen, J.L. & Lamb, R.L. (1988).** Characterizing the uncertainty of pesticide leaching in agricultural soils. *J. Contaminant Hydrology*, 2; 111-124.
- Carsel, R.F.; Mulkey, L.A.; Lorber, N. and Baskin, L.B. (1985).** The Pesticide Root Zone Model (PRZM) : a procedure for evaluating pesticide leaching threats to groundwater. *Ecological Modelling*; 30 : 49-69.
- Chen, Y.M. ; Abriola, L.M ; Alvarez, P.J.J. ; Anid, P.J. and Vogel, T.M. (1992).** Modeling Transport and Biodegradation of Benzene and Toluene in Sandy Aquifer Material : Comparisons with Experimental Measurements. *Water Resources Research*, 28 - 7 ; 1833-1847.
- Chrysikopoulos, C.V. ; Kitanidis, P.K. and Roberts, P.V. (1992).** Macrodispersion of sorbing solutes in heterogeneous porous formations with spatially periodic retardation factor and velocity field. *Water Resources Research*, 28 - 6 ; 1517-1529.
- Civita, M. (1987).** L'inquinamento delle riserve idriche sotterranee in Italia: scenari, problematiche e strategie d'intervento. *Proc. 1 Congr. Int. di Geoidrologica "l'antropizzazione e la degradazione dell'ambiente fisico"*, 299-306.
- Civita, M. (1993).** Ground water vulnerability maps: a review. *Proc. in IX Symposium Pesticide Chemistry : Mobility and degradation of xenobiotics; Piacenza, 11-13 Oct. 1993 ; 587-631.*
- Culver, T.B. ; Shoemaker, C.A. and Lion, L.W. (1991).** Impact of Vapor Sorption on the Subsurface Transport of Volatile Organic Compounds : A Numerical Model and Analysis. *Water Resources research*, 27, 9 ; 2259-2270.
- Cunge, J.A. (1966).** Etude d'un schéma de différences finies appliqué à l'intégration numérique d'un certain type d'équations hyperboliques d'écoulement. *Thèse de Docteur-Ingénieur de la Faculté des Sciences de Grenoble.*
- Cunge, J.A.; Holly, F.M., Jr. and Verwey, A. (1982).** Practical aspects of computational river hydraulics. *Pitman publ.*
- Dagan, G. (1982).** Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities - 2: The solute transport. *Water Resources Research*, 18, 4; 835-848.
- Darcy, H. (1856).** Les fontaines publiques de la ville de Dijon. *Dalmont, Paris.*
- Dean, J.D.; Huyakorn, P.S.; Donigan, A.S.; Voos, K.A.; Schanz, R.W. and Carsel, R.F. (1989).** Risk of unsaturated/saturated transport of transformation of chemical concentrations (RUSTIC). *U.S. Environmental Protection Agency, Athens, GA.*
- Delhomme, J.P. (1979).** Spatial variability and uncertainty in groundwater flow parameters: a geostatistical approach. *Water Res. Res. vol. 15, n° 2; 269-280.*
- Demailly, J.P. (1991).** Analyse numérique et équations différentielles. *Presses Universitaires de Grenoble ; 308 p.*
- Destouni, G. (1992).** Prediction uncertainty in solute flux through heterogeneous soil. *Water Resources Research*, Vol. 28, N°3 ; 793-801.

- Facchino, F. & Riparbelli, C. (1993). Aquifer vulnerability mapping using computerized systems in a Lombardian Piedmont area. *Proc. in IX Symposium Pesticide Chemistry : Mobility and degradation of xenobiotics; Piacenza, 11-13 Oct. 1993 ; 587-631.*
- Foster, S.S.D. (1987). Fundamental concepts in aquifer vulnerability, contamination risk and protection strategy. *Proc. Int. Conf. "Vulnerability of soil and groundwater to contaminants" ; RIVM proc. and Inf; 38, 69-86."*
- Gelhar, L.W. and Axness, C.L. (1983). Three dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resources Research, 19, 1; 161-180.*
- Germann, P.F. (1991). Length scales of convection-dispersion approaches to flow and transport in porous media. *Journal of Contaminant Hydrology, N° 7 ; 39-49.*
- Gerstl, Z (1990). Estimation of Organical Chemical Sorption by Soils. *Journal of Contaminant Hydrology, 6 : 357-375.*
- Gustavson, D.I. (1989). Groundwater Ubiquity Score : a simple method for assessing pesticide leachability. *Environmental Toxicology and Chemistry, vol. 8 ; 339-357.*
- Hanks, R.J. and Bowers, S.A. (1962). Numerical solution of the moisture flow equation for infiltration into layered soils. *Soil Sci. Soc. Am. Proc., vol. 26; 530-534.*
- Harrison, B. ; Sudicky, E.A. and Cherry, J.A. (1992). Numerical Analysis of Solute Migration Through Fractured Clayey Deposits into Underlying Aquifers. *Water Resources Research, 28-2 ; 515-526.*
- Hattfield, K; Samani, N. & Noss, R. (1994). "Minimum-impact modeling of nonpoint-source ground-water pollution. *J. Irrigat. drainage Engin., ASCE, 1201 (1); 149-167.*
- Hendry, K.M. and Richardson, C.J. (1988). Soil biodegradation of carbofuran and furathiocarb following soil pretreatment with these pesticides. *Environmental Toxicology and Chemistry, Vol. 7, pp 763-774, 1988.*
- Hollis, J. and Brown, C. (1993). An integrated approach to aquifer vulnerability mapping. *Proc. in IX Symposium Pesticide Chemistry : Mobility and degradation of xenobiotics; Piacenza, 11-13 Oct. 1993 ; 633-642.*
- Institut d'Aménagement et d'Urbanisme de la Région Ile-de-France (1982). Inventair de l'occupation du sol en 1982, échelle 1/25000.
- ISMAP (1993.a). Modélisation et aide à la décision. *Rapport interne projet EUREKA (phase de Définition, Sous-projet 4; pp 25-42.*
- ISMAP (1993.b). Présentation des sites-test. *Rapport interne projet EUREKA (phase de définition. Sous-projet 9; pp 12-13.; pp. 46-56.*
- Jain, S.K.; Storm, B.; Bathurst, J.C.; Refsgaard, J.C. and Singh, R.D. (1992). Application of the SHE to catchments in India Part 2. Field experiments and simulation studies with the SHE on the Kolar subcatchment of the Narmada River. *Journal of Hydrology, vol. 140; 25-47.*
- Jensen, K.H. (1983). Simulation of water flow in the unsaturated zone including the root zone. *Institute of Hydrodynamics and Hydraulic Engineering. Technical University of Denmark, series paper n° 33.*

- Jensen, H., and Refsgaard, J.C. (1992). Spatial variability of physical parameters and processes in field soils. Part III: solute transport at field scale. *Communication personnelle.*
- Jones, R.L. (1993). Assessing Movement of pesticides in agricultural environments. 355-375. *Communication personnelle.*
- Jones, R.L. and Hanks, R.J. (1990). Review of unsaturated zone leaching models from a user's perspective. *Groundwater Monitoring Review, Fall 1990, ; 129-139.*
- Jones, R.L.; Kirkland, S.D.; Chancey, E.L.; Porter, K.S.; Walker, M. and Ferro, D.N. (1992). Measurement of aldicarb degradation and movement in upstate New York and Massachusetts potato fields (U.S.A.). *Journal of Contaminant Hydrology, vol. 10; 251-271.*
- Jury, W.A., Spencer, W.F., Farmer, W.J. (1983). Behavior assessment model for trace organic chemicals in soil : 1. Description of model. *Journal of Environmental Quality, 13; 558-564.*
- Kauark-Leite, L.A. (1990). Réflexions sur l'utilité des modèles mathématiques dans la gestion de la pollution diffuse d'origine agricole. *Thèse de doctorat de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, octobre 1990.*
- Khan, S.U. (1980). Determining the role of humic substances in the fate of pesticides in the environment. *J. Environ. Sci. Health ; B15 - 6 ; 1071-1090.*
- Khan, A & Liang, T. (1989). Mapping pesticide contamination potential. *Environmental Management, 13 (2); 233-242.*
- Knisel, W.G. (1980). CREAMS: A field-scale model for chemical, runoff, and erosion for agricultural management systems. *U.S. Department of Agriculture, Conservation Research report N° 26.*
- Knisel, W.G. and Leonard, R.A. (1988). Irrigation impact on groundwater: model study in humid region. *J. Irrig. Drain. Eng. vol.115, n°5 ; 823-839.*
- Konikow, L.F. and Bredehoeft, J.D. (1978). Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in ground water. *U.S.G.S., U.S. Government Printing Office, Washington.*
- Kristensen, K.J. and Jensen, S.E. (1975). A model for estimating actual evapotranspiration from potential evapotranspiration. *Nordic Hydrology, 6; 170-188.*
- Laskowski, D.A., Goring, C.A.I., McCall, P.J. and Swann, R.L. (1982). Terrestrial environment. *Environmental risk analysis for chemicals; Van Nostrand Reinhold Co, NY; 198-240.*
- Leistra, M. (1985). Computer Simulations of the Transport of Pesticides with Nonuniform Water Flow in Greenhouse Soil. *Soil Science, 140 (3) ; 161-169.*
- Leistra, M. and Crum, S.J.H. (1990). Emission of Methyl Isothiocyanate to the Air after Application of Metham-Sodium to Greenhouse Soil. *Water, Air and Soil Pollution, 50 ; 109-121.*
- Leonard, R.A.; Knisel, W.G. and Still, D.A. (1987). GLEAMS : Groundwater Loading effects of agricultural management systems. *Trans ASAE 30: 1403-1418.*

- Leonard, R.A.; Knisel, W.G.; Davis, F.M. and Johnson, A.W. (1990). Validating GLEAMS with field data for fenamiphos and its metabolites. *J. Irrig. Drain. Eng., ASCE*, vol.116, n°1; 24-35.
- LHF (1992). Modélisation hydrologique du bassin versant du Grand Morin : Etude préliminaire. *Rapport d'étude C-0151*.
- LHF (1994). Modélisation bidimensionnelle verticale de l'hydrodynamique et du transport d'un produit phytosanitaire en milieu souterrain. *Rapport d'étude C-0142*.
- Li, C.W. and Yu, T.S. (1994). Conservative characteristics-based schemes for mass transport. *Journal of Hydraulic Eng., ASCE*; vol. 120, n° 9; 1089-1099.
- Lindstrom, F.T. and Boersma, L. (1991). Simultaneous Transport of Parent and Daughter Compounds in Aquifers with Linear First-Order Sorption Kinetics. *Journal of Contaminant Hydrology*, 7 ; 301-335.
- Loague, K.M.; Green, R.E.; Liu, C.C.K. and Liang, T.C. (1989.a). Simulation of organic chemical movement in Hawaii soils with PRZM: 1. preliminary results for Ethylene dibromide. *Pacific Science*, 43 (1); 67-95.
- Loague, K., Giambelluca, T.W.; Green, R.E., Liu, C.C.K.; Liang, T.C. and Oki, D.S. (1989.b). Simulation of organic Chemical movement in Hawaii soils with PRZM: 2. predicting deep penetration of DBCP, EDB, and TCP. *Pacific Science*, 43 (4); 362-383.
- Loague, K.M.; Yost, R.S.; Green, R.E. and Liang, T.C. (1989.c). Uncertainty in a pesticide leaching assessment for Hawaii. *J. Contaminant Hydrology*, 4; 139-161.
- Loague, K. (1991). The impact of land use on estimates of pesticide leaching potential: assessments and uncertainties. *J. Contaminant Hydrology*, 8; 157-175.
- Loague, K.; Green, R.E.; Giambelluca, T.W.; Liang, T.C. and Yost, R.S. (1990). Impact of uncertainty in soil, climatic, and chemical information in a pesticide leaching assessment. *Journal of Contaminant Hydrology*, 5; 171-194.
- Loague, K. and Green, R.E. (1991). Statistical and graphical methods for evaluating solute transport models : Overview and application. *Journal of Contaminant Hydrology*, 7; 51-73.
- ⇒ Lobo-Ferreira, J.P. and Costa-Gabral (1993). Proposal for an operational definition of vulnerability for the european community's atlas of groundwater resources. *Proc. of the "GROUNDWATER" work group; E.I.W., Bruxelles, 22 février 1991*.
- Lohani, V.K.; Refsgaard, J.C.; Clausen, T.; Erlich, M. and Storm, B. (1993). Application of SHE for Irrigation-Command-Area Studies in India. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*; vol. 113, n° 1; 34-49.
- Lubello, C. ; Preti, F. (1993). Soil vulnerability maps at basin scale : preliminary methodology. *Proc. in IX Symposium Pesticide Chemistry : Mobility and degradation of xenobiotics; Piacenza, 11-13 Oct. 1993 ; 587-631*.
- Luxmoore, R.J.; Spaulding, B.P. & Murno, I.M. (1981). Areal variation and chemical modification of weathered shale infiltration characteristics. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 45; 687-691.
- Mackay, R. and Riley, M.S. (1993). A method for geological media generation, Part 1: application to the formations of the Harwell region, Oxfordshire, UK. *Journal of Contaminant Hydrology*, à paraître.

- Mangold, D.C. and Tsang, C.F (1991). A Summary of Subsurface Hydrological and Hydrochemical Models. *Review of Geophysics*, 29,1, 51-79.
- Mantoglou, A. and Wilson, J.R. (1982). The turning Bands Method for simulation of random field using line generation by spectral method. *Water Res. Res.*, 23; 37-46.
- Marcolongo, B. et Pretto, L. (1987). Vulnerabilità degli acquiferi nella Pianura a nord di Vicenza. *Pubbl. GNDCI-CNR*. 28, 13 p.
- Marsily, G. (de) (1991). Quelques réflexions critiques sur la modélisation du transport des polluants en milieu poreux. *Rencontres hydrologiques Franco-Roumaines, Paris, 2-5 Septembre 1991*.
- Marsily, G. (de) (1993). Quelques méthodes d'approche de la variabilité spatiale des réservoirs souterrains. *Hydrogéologie*, n° 4; 259-268.
- Marsily, G. (de) (1994). Quelques réflexions sur l'utilisation des modèles en hydrologie/On the use of models in hydrology. *Revue des sciences de l'eau*, vol. 7; 219-234.
- Matheron, G. (1973). The intrinsic random functions and their applications. *Adv. Appl. Prob.*, 5; 439-468.
- Matthess, G. (1989). Behaviour of Organic Micro-pollutants in Aquifers. *Contaminant Transport in Groundwater ; Kobus & Kinzelbach ed.*
- Meeks, Y.J. and Dean, D.J. (1990). Evaluating ground-water vulnerability to pesticides. *Journal of Water Resources Planning and Management ; vol. 116, n° 5; 693-707*.
- Megnien C. (1979). Hydrogéologie du centre du bassin de Paris. *Mémoire BRGM n° 98*.
- Menzer, R.E., and Nelson, J.O. (1986). Water and Soil Pollutants. *The basic science of poisons, Macmillan Publishers, New York ; 825-853*.
- Mingelgrin, U.; Gerstl, Z. and Giat, V. (1993). The role of non-equilibrium phenomena in the mobility of xenobiotics in the unsaturated zone. *Proc. in IX Symposium Pesticide Chemistry : Mobility and degradation of xenobiotics; Piacenza, 11-13 Oct. 1993 ; 335-342*.
- Munoz-Pardo, J. (1987). Approche géostatistique de la variabilité spatiale des milieux géophysiques. Application à l'échantillonnage des phénomènes bidimensionnels par simulation d'une fonction aléatoire. *Thèse de Docteur, Université de Grenoble*.
- Nielsen, D.R.; Biggar, J.W. and Ehr, K.T. (1973). Spatial variability of field measured soil-water properties. *Hilgardia*, 42; 215-259.
- O'Brien, C.G.; Hyman, M.A. and Kaplan, S. (1951). A study of the numerical solution of partial differential equations. *J. Math. Phys.*, vol. 29; 223-251.
- Pallard, M. (1992). Modélisation hydrologique du bassin versant du Grand Morin: étude préliminaire. *Rapport de Projet de fin d'Etudes de l'Ecole Nationale Supérieure d'Hydraulique et de Mécanique de Grenoble*.
- Penell, K.D.; Hornsby, A.G.; Jessup, R.E. and Rao, P.S.C. (1990). Evaluation of five simulation models for predicting aldicarb and bromide behavior under field conditions. *Wat. Res. Res.* vol.26, n° 11; 2679-2693.

- PIREN-SEINE (1991).** Le bassin versant du Grand Morin. Premières données et installation du réseau de mesures. Rapport PIREN-SEINE III/91/05.
- Ptacek, C.J. and Gillham, R.W. (1992).** Laboratory and field measurements of non-equilibrium transport in the Borden aquifer, Ontario, Canada. *Journal of Contaminant Hydrology*, N° 10 ; 119-158.
- Ramade, F. (1992).** Précis d'écotoxicologie. *Masson*.
- Rao, P.S.C. and Jessup, R.E. (1983).** Sorption and movement of pesticides and other toxic organic substances in soils. *Chemical mobility and reactivity in soil systems ; Am. Soc. Agron, Madison, WI ; 183-201.*
- Rao, P.S.C.; Hornsby, A.G. and Jessup, R.E. (1985).** Indices for ranking the potential for pesticide contamination of groundwater. *Soil and Crop Science Society of Florida Proceedings*. 44: 1-8.
- Rao, P.S.C. and Davidson, J.M. (1980).** Estimation of pesticide retention and transformation parameters required in nonpoint source pollution models. *Environmental Impact of nonpoint source pollution*. Overcash, M.R. & Davidson J.M. ed., Ann Arbor Sci; Publ., Ann Arbor, Michigan.
- Rawls, W.J. and Brakensiek, D.L. (1983).** A procedure to predict Green and Ampt infiltration parameters. *Advances in infiltrations. Proceedings of the National Conference on advances in infiltration*. Publ. Am. Soc. Agr. Eng.
- Refsgaard, J.C.; Seth, S.M.; Bathurst, J.C.; Erlich, M.; Storm, B; Jørgensen, G.H. and Chandra, S. (1992).** Application of the SHE to catchments in India Part 1. General results. *Journal of Hydrology*, vol. 140; 1-23.
- Richards, L.A. (1931).** Capillary conduction of fluids in porous mediums. *Physics*, 1; 318-333.
- Robert (1991).** Dictionnaire de la langue française.
- Russo, D. and Bresler, E. (1981).** Soil hydraulic properties as stochastic processes, I, analysis of field spatial variability. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 45; 682-687.
- Russo, D. (1983).** A geostatistical approach to the trickle irrigation design in heterogeneous soils (1): Theory. *Water Res. Res.*, 19; 632-642.
- Sabatini, D.A. and Austin, T.A (1990).** Sorption and Transport of Pesticides in Ground Water : Critical Review. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*; vol. 116, n° 1; 3-15.
- SCEES-INSEE (1988).** Recensement agricole 1988. *Service central des enquêtes et études statistiques, Ministère de l'agriculture et de la forêt - Institut national de la statistique études économiques, Paris*.
- Schmitz, G. (1993).** Transient infiltration from cavities. I: Theory. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, vol. 119, n°3; 443-457.
- Schmitz, G. (1993).** Transient infiltration from cavities. II: Analysis and application. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, vol. 119, n°3; 458-470.
- Sharma, M.L., Gardner, G.A. and Hunt, C.G. (1980).** Spatial variability of infiltration in watershed. *J. of Hydrol.*, 45; 101-122.

- Shinozuka, M. and Jan, C.M. (1972).** Digital simulation of random processes and its applications. *Journal of Sound and Vibration*, 25; 111-128.
- Sisson, J.B. & Wierenga, P.J. (1981).** Spatial variability of steady infiltration rates as a stochastic process. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 45; 699-704.
- Smedt, F. (de) and Wierenga, P.J. (1978).** Approximate analytical solution for the solute flow during infiltration and redistribution. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 42; 407-412.
- Smith, G.D. (1978).** Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods. *Clarendon Press, Oxford*.
- SOGREAH (1961).** MM Rozier et Jacquesson. Aménagement de la vallée du Grand Morin. Etudes préliminaires. *Rapport d'étude R.7800*.
- Steenhuis ; T.S., Staubitz, W. ; Andreini, M.S. ; Surface, J. ; Richard, T.L. ; Paulsen, R. ; Pickering, N.B. ; Hagerman, J.R. and Geohring, L.D. (1990).** Preferential Movement of Pesticides and Tracers in Agricultural Soils. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, 116, 1 ; 50-66.
- Stover, J.A. and Guitjens, J.C. (1990).** Aldicarb in Vadose Zone : Review. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, 116, 136-49.
- Thony, J.L. (1970).** Etude expérimentale des phénomènes d'hystérésis dans les écoulements en milieux poreux non-saturés. *Thèse de Docteur-Ingénieur, Grenoble*.
- Tracy, J.C. (1992).** Movement of Nonpoint-Source Contaminants through Heterogeneous Soils. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, 118-1 ; 88-103.
- Trevisan, M; Nassisi, A.; Capri, E.; Lega, P.; Libe, A.; Zinoni, F.; Russo, E. ; Fava, A. and Sassi, E. (1993).** The use of Contamination potential indices to assess aquifer vulnerability in the north east area of Piacenza province (Italy). *Proc. in IX Symposium Pesticide Chemistry : Mobility and degradation of xenobiotics; Piacenza, 11-13 Oct. 1993 ; 739-746*.
- Ünlü, K. (1994).** Assessing risk of Ground-water pollution from land-disposed wastes. *J. Environ. Eng.* 120 (6); 1578-1597.
- US Department of Agriculture (1984).** User's Guide for the CREAMS computer model.
- Usseglio-Polatera, J.M. (1988).** Validation of ARGOS modelling system. *7th International Conference on computational methods in Water Resources : Convection-diffusion forum, MIT, Cambridge, USA, juin 1988*.
- Usseglio-Polatera, J.M. and Cunge, J.A. (1985).** Modelling of Pollutant and suspended sediment transport with ARGOS modeling system. *International Conference on Numerical and Hydraulic Modeling of Ports and Harbours, BHRA, Birmingham, UK, Avril 1985*.
- Usseglio-Polatera, J.M. and Holly, F.M.Jr. (1984).** Dispersion simulation in two-dimensional tidal flow. *Journal of the Hydraulics Division, ASCE, Juillet 1984 ; 905-926*.
- Usseglio-Polatera, J.M. and Gatti, S. (1993).** Information and decision support systems for the management of agricultural pollution. *Proc. in IX Symposium Pesticide Chemistry : Mobility and degradation of xenobiotics; Piacenza, 11-13 Oct. 1993 ; 739-746*.

- Usseglio-Polatera, J.M. et Libaux, A. (1990). Numerical Modelling of transient flow in marine breakwaters/modélisation numérique des écoulements transitoires dans les digues en mer. 6th international congress of the International Association of Engineering Geology, Amsterdam, Pays-Bas, 6-10 août 1990.
- Vachaud, G. and Vauclin, M. (1992). Water and soil: circulation and risks of pollution. In *Advances in Theoretical Hydrology - A tribute to James Dooge, J.P. O'Kane ed.*, Elsevier 1992,; 209-218.
- Valocchi, A.J. (1989). Spatial moment analysis of the transport of kinetically adsorbing solutes through stratified aquifers. *Water Resources Research*, 25-2; 273-279.
- Van Genuchten M.Th and Wierenga, P.J. (1976). Mass transfer studies in sorbing porous media: Analytical solutions. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 40; 473-479.
- Van der Zee, S.E.A.T.M. and Boesten, J.J.T.I. (1991). Effects of Soil Heterogeneity on Pesticide Leaching to Groundwater. *Water Resources Research*, 27-12 ; 3051-3063.
- Vauclin, M. (1971). Effets dynamiques sur la relation succion-teneur en eau, lors d'écoulements en milieu saturé. *Thèse de Docteur-Ingénieur, Grenoble.*
- Vauclin, M. (1982). Méthodes d'étude de la variabilité spatiale des propriétés d'un sol. *Colloque SHF-INRA Avignon (France).*
- Vauclin, M. (1994). Modélisation du transport de solutés dans la zone non saturée du sol. *Revue des sciences de l'eau*, 7; 81-102.
- Vauclin, M.; Khanji, D. et Vachaud, G. (1976). Etude expérimentale et numérique du drainage et de la recharge des nappes à surface libre, avec prise en compte de la zone non saturée. *Journal de Mécanique*, vol. 15, n° 2; 307-340.
- Vauclin, M.; Haverkamp, R. et Vachaud, G. (1979). Résolution numérique d'une équation de diffusion non linéaire - Application à l'infiltration de l'eau dans des sols non saturés. *Presses universitaires de Grenoble*, 183 p.
- Vieira, S.R.; Nielsen, D.R. and Biggar, J.W. (1981). Spatial variability of field-measured infiltration rate. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 45; 1040-1048.
- Vrana, M. (1984). Methodology for construction of groundwater protection maps. *Hydrogeologic principles of Groundwater Protection*, Kazlovsky E.A. ed. UNESCO/UNEP, Moscou, 147-149.
- Wagenet, R.J. (1993). A review of pesticide leaching and their application to field and laboratory data. *Proc. in IX Symposium Pesticide Chemistry : Mobility and degradation of xenobiotics; Piacenza, 11-13 Oct. 1993 ; 33-62.*
- Wagenet, R.J. and Hutson, J.L. (1989). LEACHM. A process-based model of water and solute movement, transformations, plant uptake and chemical reactions in the unsaturated zone. *Department of Agronomy, Cornell University - Ithaca, NY 14853.*
- Westall, J.C. (1983). Properties of organic compounds in relation to chemical binding. *Proc. Biofilm processes in groundwater research, Stockholm 1983; 35-90.*
- Yeh, W.W.G. (1986). Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: the inverse problem. *Water Res. Res.*, vol. 22, n° 2; 95-108.

- Yeh, W.W.G. (1987). On the ill-posedness of the inverse problem. In *Proc. XXII IAHR congress: Topics in hydraulic modelling; Lausanne, 31.aout-4 Oct. 1987; 397-401.*
- Yeh, W.W.G. and Sun, N.Z. (1984). An extended identifiability in aquifer parameter identification and optimal pumping test design. *Water Res. Res.*, vol. 20, n° 12; 1387-1847.
- Yen, B.C. (1989). Some recent progresses in risk and uncertainty analysis for hydraulic structure designs. *Proc. in Assessment of risk and uncertainties in the design of hydraulic structures. Seminar 3, Ottawa, 1989; 2-39.*

ANNEXE I
MODES DE DISCRETISATION AUX DIFFERENCES FINIES DES
EQUATIONS DE L'ECOULEMENT EN MILIEU SOUTERRAIN

Le but de cette annexe est d'exposer différentes méthodes de discrétisation en différences finies des équations de l'écoulement dans les zones saturée et non saturée du sol. On s'attardera en particulier sur les avantages et les inconvénients des méthodes de discrétisation utilisées dans le logiciel MIKE SHE.

AI-1. RESOLUTION UNIDIRECTIONNELLE VERTICALE DES EQUATIONS DE
L'ECOULEMENT DANS LA ZONE NON SATUREE

L'équation la plus généralement employée pour la description des écoulements dans la zone non saturée est l'équation de Richards. Elle est en particulier utilisée par le logiciel MIKE SHE, c'est donc à ses modes de discrétisation que nous nous intéresserons ici.

AI-1.1. Rappel sur la loi de Richards

L'équation de Richards, résultant de la combinaison de la loi de Darcy généralisée et du principe de continuité, est la suivante (Cf. § I-2.):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \text{Div}(K \text{Grad } H) + Q_h \quad (\text{AI.1})$$

où K (m.s^{-1}) représente le tenseur de perméabilité (non isotrope dans le cas général), θ la teneur volumique en eau dans le sol, H (m) la charge totale, Grad l'opérateur vectoriel de gradient et Q_h (s^{-1}) le terme source.

La charge totale H est donnée par:

$$H = \psi + z \quad (\text{AI.2})$$

où ψ est la pression capillaire, z la coordonnée verticale (orientée croissante vers le haut).

L'opérateur gradient de charge est alors donné par:

$$\text{Grad } H \begin{vmatrix} \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ \frac{\partial \psi}{\partial y} \\ \frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \end{vmatrix} \quad (\text{AI.3})$$

L'équation (AI.1) fait apparaître deux variables dépendantes, la teneur en eau θ et la pression capillaire ψ . Pour résoudre cette équation, on élimine l'une ou l'autre de ces deux variables.

Le système MIKE SHE opte pour une élimination de θ : en effet, lorsque l'on se trouve à l'interface entre deux milieux différents, la condition de continuité porte sur les pressions capillaires, et non sur les teneurs en eau. On fait alors intervenir la capacité capillaire C_c ,

donnée par:

$$C_c = \frac{d\theta}{dh} \quad (AI.4)$$

La capacité capillaire C_c peut être obtenue pour chaque valeur de ψ à partir de la courbe de succion $\psi(\theta)$. L'équation (AI.1) devient alors:

$$C_c \frac{\partial \psi}{\partial t} = \text{Div}(K \text{Grad } H) + Q_h \quad (AI.5)$$

Le logiciel MIKE SHE fait l'hypothèse d'un écoulement quasi-vertical dans la zone non saturée. En l'absence de fortes pentes du terrain, on peut démontrer à partir de considérations théoriques (Aboujaoudé, 1991, pp 102-103), que les effets sur l'écoulement induits par les gradients de teneur en eau suivant l'horizontale peuvent être négligés devant l'effet gravitationnel, responsable en majeure partie de la composante verticale de l'écoulement. Dans le logiciel MIKE SHE, la résolution de l'équation de Richards s'effectue de façon découplée, sur des colonnes de sol considérées comme indépendantes. Pour chaque colonne de sol, on résout alors l'équation suivante, sur la verticale:

$$C_c \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right) \right] + Q_h \quad (AI.6)$$

AI-1.2. Résolution numérique

On trouvera dans Vauclin et al. (1979) un inventaire détaillé des méthodes de résolution de l'équation de Richards. Le but ici est d'en détailler quelques-unes en indiquant leurs avantages et leurs inconvénients.

AI-1.2.1. Principe du schéma décalé à trois points

Le type de schéma le plus utilisé pour la résolution numérique des équations de l'écoulement dans la zone non saturée est un schéma à trois points en espace, de type décalé (cf. fig. AI-1): la variable de calcul ψ étant définie aux points de calcul (i, n) (i : position du point dans l'espace; n : niveau temporel de la résolution), les flux (faisant intervenir la dérivée spatiale d'ordre 1 de ψ) sont estimés aux interfaces entre les points voisins, les dérivées temporelles étant estimées entre deux niveaux temporels successifs, aux points de calcul. Le membre droit de (AI.6) faisant intervenir la dérivée spatiale du flux, on utilise trois points en espace, d'où le nom de schéma à trois points. Les interfaces sont situées à mi-chemin des points de calcul. Nous nous intéresserons ici plus particulièrement à l'estimation des flux aux interfaces.

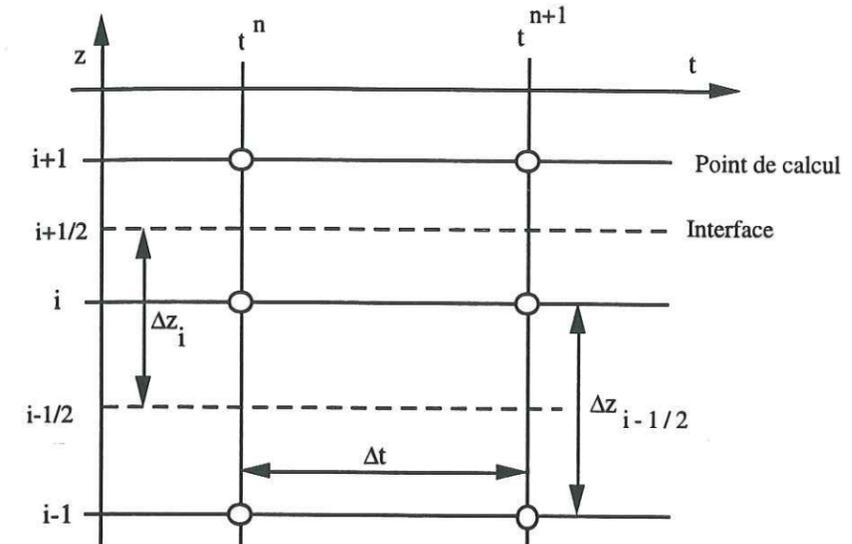


Figure AI-1: Schéma de discrétisation unidirectionnel à trois points de l'équation de Richards

Supposons que l'équation discrétisée ait été résolue au pas de temps n et que l'on cherche la solution au pas de temps suivant, $n+1$. La vitesse de Darcy $Vd_{i+1/2}^n$ discrétisée au pas de temps n au niveau de l'interface $i+1/2$ est donnée par:

$$Vd_{i+1/2}^n = -K_{i+1/2}^n \left(\left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right)_{i+1/2}^n + 1 \right) \quad (AI.7)$$

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right)_{i+1/2}^n \equiv \frac{\psi_{i+1/2}^n - \psi_i^n}{\Delta z_{i+1/2}} \quad (AI.8)$$

L'équation complète est alors discrétisée, entre les dates n et $(n+1)$, suivant:

$$C_i^{n+1/2} \frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta t} = \varepsilon \frac{Vd_{i+1/2}^{n+1} - Vd_{i+1/2}^n}{\Delta z_i} + (1 - \varepsilon) \frac{Vd_{i+1/2}^n - Vd_{i+1/2}^{n-1}}{\Delta z_i} \quad (AI.9)$$

où ε est le paramètre d'implication du schéma numérique: si ε est égal à 1, le schéma est totalement implicite, *i.e.* les flux sont exprimés en fonction des valeurs de la solution au pas de temps $(n+1)$. Si ε vaut 0, le schéma est au contraire totalement explicite. Les schémas implicites présentent l'avantage d'être inconditionnellement stables, alors que les schémas explicites sont assortis d'une condition de stabilité, *i.e.* d'une limitation du pas de temps. L'équation à résoudre étant fortement non-linéaire, les schémas implicites font appel à des procédures itératives.

Dans la mise en oeuvre de (AI.7), la façon dont $K_{i+1/2}^n$ est estimé revêt une certaine influence sur les résultats de calcul. Il existe plusieurs manières d'estimer la valeur de $K_{i+1/2}^n$. Nous nous intéresserons dans le paragraphe suivant aux trois méthodes principales employées actuellement par les concepteurs de logiciels.

AI-1.2.2. Méthodes d'estimation de la conductivité hydraulique à l'interface

Moyenne arithmétique

La manière la plus intuitive de déterminer la conductivité hydraulique à l'interface est d'effectuer une moyenne arithmétique sur les points adjacents:

$$K_{i+1/2}^n \cong \frac{K_i^n + K_{i+1}^n}{2} \quad (AI.10)$$

En effectuant un développement en série de Taylor au niveau de l'interface, on obtient l'erreur de troncature associée à l'estimation par la moyenne arithmétique:

$$K_{i+1/2}^n = K + \frac{\Delta x^2}{8} K'' + o(\Delta x^4) \quad (AI.11)$$

où K désigne la valeur de la solution réelle à l'interface ($i+1/2$) et K'' sa dérivée seconde par rapport à x .

Cette méthode est utilisée dans le logiciel MIKE SHE, avec une formulation totalement implicite; elle est d'ailleurs largement rencontrée dans la littérature (Jensen, 1983, Vauclin et al., 1976). Elle ne prend cependant pas formellement en compte les discontinuités des milieux. C'est pourquoi on lui préfère parfois la formulation en moyenne harmonique, exposée ci-dessous.

Moyenne harmonique

Supposons que les points i et $i+1$ soient situés dans des milieux de caractéristiques hydrodynamiques très différentes (différence des conductivités à saturation, par exemple): par conservation des flux, la vitesse de Darcy est la même de part et d'autre de l'interface ($i+1/2$), mais le gradient de charge est discontinu au niveau de cette interface. Introduisons alors $H_{i+1/2}^n$, valeur de la charge à l'interface. Le principe de conservation implique, à l'ordre

1 en espace:

$$V_{d\ i+1/2}^n = -2 K_i^n \frac{H_{i+1/2}^n - H_i^n}{\Delta z_{i+1/2}} \quad (AI.12.a)$$

$$= -2 K_{i+1}^n \frac{H_{i+1}^n - H_{i+1/2}^n}{\Delta z_{i+1/2}} \quad (AI.12.b)$$

en égalant (AI.12.a) et (AI.12.b), on trouve la valeur de $H_{i+1/2}^n$:

$$H_{i+1/2}^n = \frac{K_{i+1}^n H_{i+1}^n - K_i^n H_i^n}{K_i^n + K_{i+1}^n} \quad (AI.13)$$

En remplaçant (AI.13) dans l'une des deux formules précédentes, on trouve alors:

$$V_{d\ i+1/2}^n = -2 \frac{K_i^n K_{i+1}^n}{K_i^n + K_{i+1}^n} \frac{H_{i+1/2}^n - H_i^n}{\Delta z_{i+1/2}} \quad (AI.14)$$

Ce qui donne:

$$K_{i+1/2}^n \cong 2 \frac{K_i^n K_{i+1}^n}{K_i^n + K_{i+1}^n} \quad (AI.15)$$

L'erreur de troncature sur la conductivité est obtenue par un développement en série de Taylor:

$$K_{i+1/2}^n = K + \frac{\Delta z^2}{8} K'' - \frac{\Delta z^2}{4} \frac{K' \cdot 2}{K} + \frac{\Delta z^3}{4} \frac{K' \cdot 3}{K^2} + o(\Delta z^4) \quad (AI.16)$$

K , K' et K'' désignant les valeurs de la solution réelle et de ses dérivées première et seconde au niveau de l'interface.

De telles méthodes de calcul de la conductivité hydraulique à l'interface des points de calcul sont fréquemment utilisées dans les modèles d'écoulements dans la zone saturée. Comme dit précédemment, ils présentent l'avantage de tenir compte de la rupture de pente dans la fonction $H(z)$. Leur utilisation est particulièrement adaptée à la simulation des écoulements dans des milieux stratifiés selon la verticale (Hanks and Bowers, 1962).

On verra plus loin que ce schéma est également bien adapté à la résolution des écoulements en aquifère; il est par ailleurs utilisé dans le modèle MIKE SHE pour la résolution de l'équation de Boussinesq.

Moyenne géométrique

En raison de la forte non-linéarité de la dépendance qui lie la conductivité hydraulique et la teneur en eau, on peut envisager une troisième approche pour calculer la conductivité à l'interface: en partant du fait que les profils de teneur en eau seront plus "lisses" que les profils de charge ou de conductivité hydraulique, une estimation de la conductivité à l'interface à partir de la teneur en eau au niveau de cette interface donnera une meilleure estimation. On aura alors:

$$K_{i+1/2}^n = K(\theta_{i+1/2}^n) \quad (AI.17)$$

en estimant la teneur en eau à l'interface par la moyenne arithmétique des deux points adjacents:

$$K_{i+1/2}^n = K \left(\frac{\theta_i^n + \theta_{i+1}^n}{2} \right) \quad (AI.18)$$

alors, en prenant pour hypothèse que la conductivité hydraulique est assez bien décrite par une loi de type exponentiel:

$$K(\theta) = K_s e^{a(\theta - \theta_s)} \quad (AI.19)$$

où K_s , θ_s sont la perméabilité et la teneur en eau à saturation et a un facteur de proportionnalité, on obtient alors:

$$K_{i+1/2}^n = K_s e^{a \left(\frac{\theta_i^n - \theta_s}{2} + \frac{\theta_{i+1}^n - \theta_s}{2} \right)} = \left(K_i^n K_{i+1}^n \right)^{1/2} \quad (AI.20)$$

L'erreur de troncature sur la conductivité est la suivante:

$$K_{i+1/2} = K + \frac{Dz^2}{8} \left(K'' - \frac{K'^2}{K} \right) + \frac{\Delta x^3}{16} \frac{K'^3}{K^2} + o(\Delta x^4) \quad (AI.21)$$

Lors d'une étude comparative de divers schémas numériques, Vauclin et al. (1979) ont montré que cette méthode reproduisait avec une assez bonne précision les variations de la teneur en eau observées lors d'essais d'infiltration et que, par rapport aux deux méthodes de pondération précédentes, elle montrait l'écart le plus faible avec la solution de Philip. Bien que les erreurs de troncature de ces trois schémas soient identiques, leur valeur numérique est différente dans les applications considérées par Vauclin et al. (1979).

AI-2. RESOLUTION DES EQUATIONS DE L'ÉCOULEMENT DANS LA ZONE SATURÉE

Il existe deux grandes familles de modes de résolution des équations de l'écoulement en aquifère: les méthodes tridimensionnelles et les méthodes multicouches. Dans les méthodes tridimensionnelles, le domaine de calcul est décrit par un assemblage d'éléments alignés dans les trois directions de l'espace. Les descriptions multicouches font appel à un découpage du domaine en couches de calcul (d'où leur nom). Les différences entre les deux méthodes sont les suivantes:

- la description tridimensionnelle permet de prendre en compte toutes les topologies possibles, parfois au prix d'un grand nombre d'éléments de calcul;
- la description multicouches fait l'hypothèse que deux couches de calcul superposées ont la même topologie, ce qui limite les applications possibles. En revanche, la position de chaque couche de calcul pouvant être définie à la discrétion de l'utilisateur, des structures de topologie complexe (couches d'épaisseur, de pendage variables) peuvent être prises en compte avec un nombre de points de calcul beaucoup plus restreint que par la description tridimensionnelle. De plus, dans un logiciel comme MIKE SHE, destiné à modéliser le comportement sur de grandes étendues de formations géologiques, souvent formées de couches superposées, une telle description est justifiée. C'est à cette option que nous nous intéresserons dans ce paragraphe.

AI-2.1. L'équation de Boussinesq

L'équation de Boussinesq fait appel à l'hypothèse que la ligne de charge dans les différentes couches de l'aquifère a une pente faible, et que les écoulements peuvent donc être considérés comme quasi-horizontaux. L'équation de Boussinesq, pour chaque couche de calcul, est la suivante:

$$S_y \frac{\partial H}{\partial t} = \text{Div} (K h_c \text{Grad} H) + Q \quad (AI.22)$$

où S_y (adimensionnel) est le coefficient d'emmagasinement, H (m) la charge, K (m.s^{-1}) la conductivité hydraulique, h_c (m) l'épaisseur saturée et Q (m.s^{-1}) le terme de recharge (provenant des pompages/injections et de la variation de stock dans la zone non saturée).

AI-2.2. Evaluation des différentes méthodes de pondération de la transmissivité

Bien que les méthodes de pondération exposées ci-dessus aient la même erreur de troncature, on peut démontrer que leurs comportements sont différents, même dans des configurations simples d'écoulement. Nous en fournissons comme preuve les résultats obtenus sur deux cas-test unidirectionnels: le calcul de la surface piézométrique dans une nappe libre idéalisée (cf. § AI-2.2.1.), et un calcul d'écoulement dans une nappe confinée barrée par une couche semi-perméable (cf. § AI-2.2.2.). Ces cas sont typiques de ceux que l'on peut rencontrer sur le site du Grand Morin, étudié dans le cadre de cette thèse (cf. chapitre III).

AI-2.2.1. Nappe libre idéalisée en régime permanent

On considère (Cf. figure AI-2) une nappe libre alimentée, à sa limite droite, par un débit Q_1 de recharge latéral constant dans le temps. À sa limite gauche, elle se décharge par suintement dans un tronçon de rivière. On suppose connus le débit de recharge latérale Q_1 ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$) et la hauteur de suintement h_s (m) (imposée par la géométrie de la rivière). On suppose que la configuration est répétée identiquement dans la direction perpendiculaire au plan de la figure, ce qui justifie l'adoption d'une résolution unidirectionnelle. Par commodité, on place la surface de suintement à l'abscisse ($x=0$).

On suppose la conductivité hydraulique homogène sur tout le domaine. La recharge de la nappe par la surface du sol est négligée.

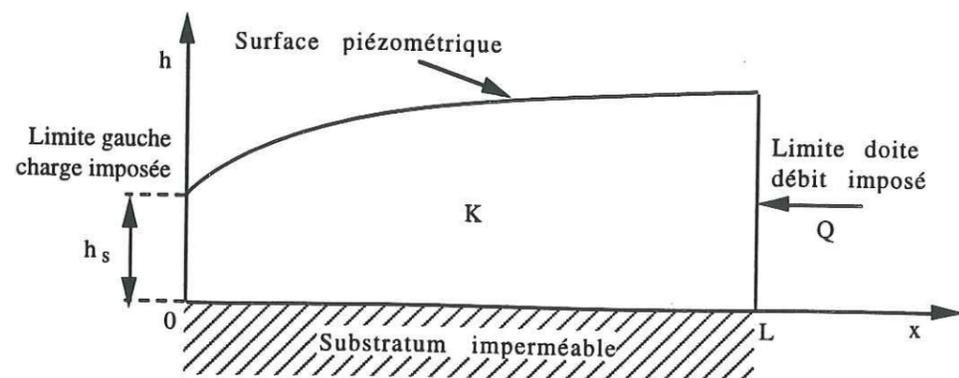


Figure AI-2: configuration de calcul pour la nappe libre idéalisée

Solution analytique

Si l'on désigne par K la perméabilité de l'aquifère, L sa largeur et $h(x)$ la cote piézométrique à l'abscisse x , on a, en régime permanent:

$$K h \frac{\partial h}{\partial x} = -Q_l \tag{AI.23}$$

qui se résout en:

$$h(x) = \sqrt{h_s^2 - \frac{2 Q_l x}{K}} \tag{AI.24}$$

Estimation par la moyenne arithmétique

Le domaine est discrétisé suivant un pas d'espace donné Δx . Au point de calcul ($i=1$), la charge h_1 est égale à l'épaisseur de suintement h_s . Si l'on opte pour une discrétisation par la moyenne arithmétique pour le calcul de la transmissivité internodale, on obtient la relation entre les charges en deux points de calcul voisins:

$$K \frac{h_i + h_{i+1}}{2} \frac{h_{i+1} - h_i}{\Delta x} = -Q_l \tag{AI.25}$$

soit:

$$h_{i+1} = \sqrt{h_i^2 - \frac{2 Q_l \Delta x}{K}} \tag{AI.26}$$

ce qui est exactement la solution analytique (AI.23).

Estimation par la moyenne harmonique

La discrétisation de l'équation (AI.22) donne:

$$K \frac{2 h_i h_{i+1}}{h_i + h_{i+1}} \frac{h_{i+1} - h_i}{\Delta x} = -Q_l \tag{AI.27}$$

ou encore:

$$h_{i+1}^2 + h_{i+1} \left[-h_i + \frac{Q_l \Delta x}{2 K h_i} \right] + \frac{Q_l \Delta x}{2 K} \tag{AI.28}$$

ce qui donne:

$$h_{i+1} = \frac{1}{2} \left[h_i - \frac{Q_l \Delta x}{2 K h_i} + \sqrt{\left(h_i - \frac{Q_l \Delta x}{2 K h_i} \right)^2 - \frac{2 Q_l \Delta x}{K}} \right] \tag{AI.29}$$

On notera que c'est cette formulation qui a été adoptée dans le logiciel MIKE SHE. Elle est largement employée dans les outils de modélisation des écoulements en aquifère, car elle permet de prendre en compte les discontinuités de la conductivité hydraulique.

Estimation par la moyenne géométrique

La discrétisation de l'équation (AI.22) donne alors:

$$K \sqrt{h_i h_{i+1}} \frac{h_{i+1} - h_i}{\Delta x} = -Q_l \tag{AI.30}$$

qui devient, par élévation au carré:

$$h_{i+1}^3 - 2 h_i h_{i+1}^2 + h_i^2 h_{i+1} - \frac{4 Q_l^2 \Delta x^2}{K^2 h_i} = 0 \tag{AI.31}$$

Dans nos applications, la relation (AI.30) a été résolue par dichotomie.

Comparaison des différentes méthodes d'estimation

Nous avons adopté pour nos essais les jeux de paramètres suivants:

$K = 10^{-3} \text{ m.s}^{-1}$ (perméabilité de la nappe);

$L = 2 \text{ km}$ (largeur de la nappe);

$Q_l = 10^{-3} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ (débit de recharge);

$\Delta x = 100 \text{ m}$ (pas d'espace);

$h_s = 0,5 \text{ m}$ et 2 m (première et deuxième simulations respectivement).

Les figures AI-3 et AI-4 permettent de comparer les solutions données par les trois méthodes d'estimation.

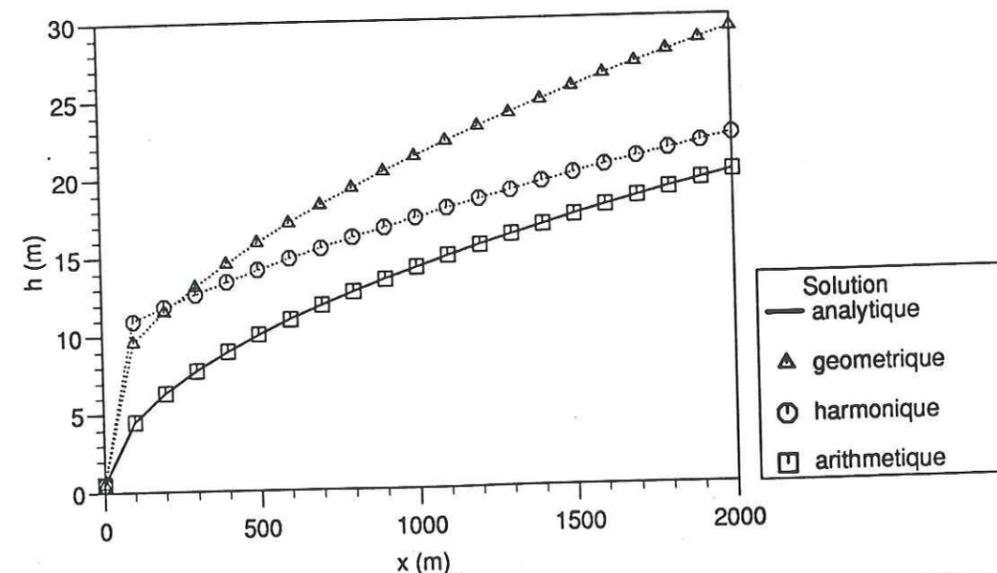


Figure AI-3: comparaison des effets des méthodes d'estimation pour une hauteur de suintement de 0,5 m

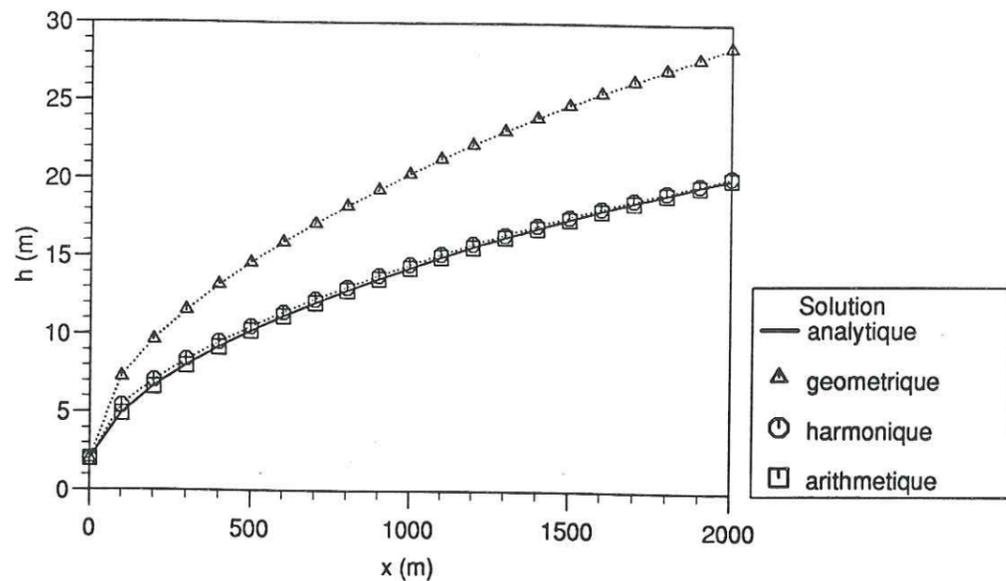


Figure AI-4: comparaison des effets des méthodes d'estimation pour une hauteur de suintement de 2 m

On peut tirer les conclusions suivantes:

- l'estimation de la conductivité à l'interface par une moyenne arithmétique des conductivités aux points de calcul permet de retrouver la solution analytique, au moins quand la conductivité est homogène;
- dans le cas de forts gradients de charge, l'estimation par la moyenne harmonique, qui tend à sous-estimer la conductivité hydraulique, accentue le gradient de charge et cause un écart par rapport à la solution analytique. Toutefois, cet écart diminue à mesure que le gradient de charge devient plus faible;
- l'estimation par la moyenne géométrique s'éloigne fortement de la solution analytique, ce qui peut causer une erreur importante sur l'estimation du stock d'eau contenu dans l'aquifère, ainsi que sur les flux, puisqu'à débit égal, la différence de charge entre les deux extrémités du modèle est 1,5 fois plus importante que pour les deux autres méthodes.

AI-2.3.1. Nappe captive barrée par une couche semi-perméable en régime permanent

Le cas étudié est le suivant (cf. figure AI-5): une portion de nappe captive, de longueur L, est traversée par l'eau à une vitesse de Darcy V_d . L'aquifère, de conductivité homogène K, est barré par une inclusion semi-perméable de conductivité hydraulique k, délimitée par les abscisses x_1 et x_2 .

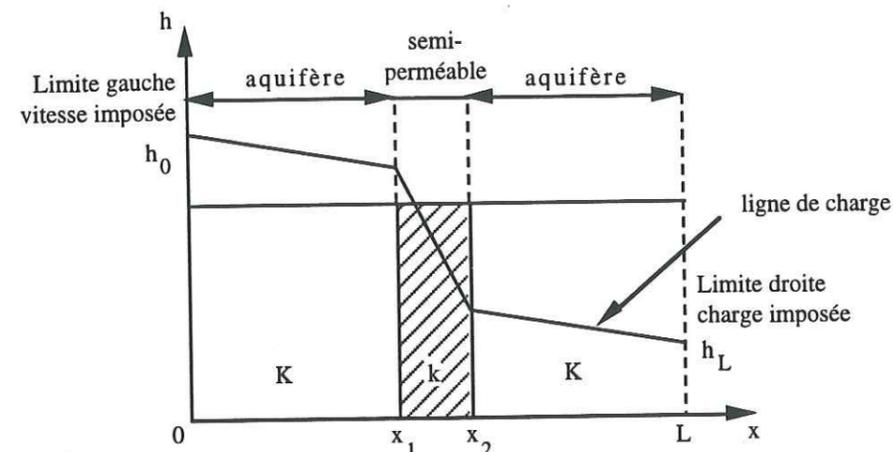


Figure AI-5: configuration de calcul pour la nappe captive barrée par une couche semi-perméable

Solution analytique

Si l'on désigne par $h(x)$ la valeur de la charge piézométrique à l'abscisse x, on a, en régime permanent:

$$K \frac{\partial h}{\partial x} = -V_d \tag{AI.32}$$

où q est la vitesse de Darcy. La solution $h(x)$ de cette équation est une fonction linéaire par morceaux, donnée par:

$$h(x) = h_0 - \frac{V_d x}{K} \quad \text{si } 0 < x < x_1 \tag{AI.33.a}$$

$$= h_0 - \frac{V_d x_1}{K} - \frac{V_d (x - x_1)}{k} \quad \text{si } x_1 < x < x_2 \tag{AI.33.b}$$

$$= h_0 - V_d \left(\frac{x_1}{K} + \frac{x_2 - x_1}{k} + \frac{x - x_2}{K} \right) \quad \text{si } x_2 < x < L \tag{AI.33.c}$$

la différence de charge entre les deux limites du domaine est donnée par:

$$h_0 - h_L = V_d \left(\frac{L - l}{K} + \frac{l}{k} \right) \tag{AI.34}$$

où l désigne l'épaisseur de la barrière semi-perméable.

Estimation par la moyenne arithmétique

L'estimation de la conductivité à l'interface par la moyenne arithmétique donne les résultats suivants:

$$K_{i+1/2} = K_i = K_{i+1} \quad \text{si } i \text{ et } i+1 \text{ appartiennent au même milieu} \tag{AI.35.a}$$

$$K_{i+1/2} = \frac{K_i + K_{i+1}}{2} \quad \text{si } i \text{ et } i+1 \text{ sont situés dans deux milieux différents} \tag{AI.35.b}$$

Alors, on a :

$$h_i = h_{i+1} + \frac{V_d \Delta x}{K_i} \quad \text{si } i \text{ et } i+1 \text{ sont situés dans le même milieu} \tag{AI.36.a}$$

$$h_i = h_{i+1} + \frac{2 V_d \Delta x}{K_i + K_{i+1}} \quad \text{si } i \text{ et } i+1 \text{ sont situés dans deux milieux différents} \tag{AI.36.b}$$

Un développement en série de Taylor permet de déterminer l'erreur de troncature associée à cette estimation:

$$K_{i+1/2} \frac{h_{i+1} - h_i}{\Delta x} - K_{i-1/2} \frac{h_i - h_{i-1}}{\Delta x} = \frac{d}{dx} \left(K \frac{dh}{dx} \right) + \frac{\Delta x^2}{12} \left[\frac{d}{dx} \left(\frac{d^2 K}{dx^2} \frac{dh}{dx} \right) + \frac{d}{dx} \left(K \frac{d^3 h}{dx^3} \right) + \frac{d}{dx} \left(\frac{dK}{dx} \frac{d^2 h}{dx^2} \right) + \frac{d^2 K}{dx^2} \frac{d^2 h}{dx^2} \right] + o(\Delta x^4) \quad (A1.37)$$

les valeurs de la conductivité K et de ses dérivées première à quatrième étant prises au niveau du point i.

Estimation par la moyenne harmonique

On a dans ce cas:

$$h_i = h_{i+1} + \frac{V_d \Delta x}{K_i} \quad \text{si } i \text{ et } i+1 \text{ sont situés dans le même milieu} \quad (A1.38.a)$$

$$h_i = h_{i+1} + \frac{2 V_d (K_i + K_{i+1}) \Delta x}{K_i K_{i+1}} \quad \text{si } i \text{ et } i+1 \text{ sont situés dans deux milieux différents} \quad (A1.38.b)$$

ce qui correspond à la solution analytique. En effet, la formulation en moyenne harmonique a été déterminée explicitement pour tenir compte des ruptures de pente dans la ligne de charge, et en faisant l'hypothèse d'une variation linéaire de la charge entre les points de calcul, ce qui correspond exactement au cas traité.

L'erreur de troncature associée à cette formulation est peu différente:

$$K_{i+1/2} \frac{h_{i+1} - h_i}{\Delta x} - K_{i-1/2} \frac{h_i - h_{i-1}}{\Delta x} = \frac{d}{dx} \left(K \frac{dh}{dx} \right) + \frac{\Delta x^3}{12} \left[\frac{d}{dx} \left(\frac{d^2 K}{dx^2} \frac{dh}{dx} \right) + \frac{d}{dx} \left(K \frac{d^3 h}{dx^3} \right) + 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{dK}{dx} \frac{d^2 h}{dx^2} \right) + 3 \frac{dK}{dx} \frac{d}{dx} \left(\frac{dK}{dx} \frac{dh}{dx} - K \frac{dK}{dx} \right) \right] + o(\Delta x^4) \quad (A1.39)$$

Estimation par la moyenne géométrique

Dans le cas de la moyenne géométrique, on a:

$$h_i = h_{i+1} + \frac{V_d \Delta x}{K_i} \quad \text{si } i \text{ et } i+1 \text{ sont situés dans le même milieu} \quad (A1.40.a)$$

$$h_i = h_{i+1} + \frac{2 V_d \Delta x}{\sqrt{K_i K_{i+1}}} \quad \text{si } i \text{ et } i+1 \text{ sont situés dans deux milieux différents} \quad (A1.40.b)$$

et l'erreur de troncature sur l'équation discrétisée est:

$$K_{i+1/2} \frac{h_{i+1} - h_i}{\Delta x} - K_{i-1/2} \frac{h_i - h_{i-1}}{\Delta x} = \frac{d}{dx} \left(K \frac{dh}{dx} \right) + \frac{\Delta x^2}{24} \left[2 \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} \left(K \frac{d^3 h}{dx^3} \right) + 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{dK}{dx} \frac{d^2 h}{dx^2} \right) + 5 \frac{d^2 K}{dx^2} \right]$$

$$\frac{d^2 h}{dx^2} + 4 \frac{d^3 K}{dx^3} + \frac{3}{K^2} \left(\frac{dK}{dx} - 2K \right) \frac{d}{dx} \left(K \frac{dK}{dx} \right) \right] + o(\Delta x^4) \quad (A1.41)$$

Comparaison des méthodes d'estimation

Nous avons adopté pour nos essais les jeux de paramètres suivants:

K = 10^{-3} m.s⁻¹ (perméabilité de la nappe captive);

k = 10^{-5} m.s⁻¹ (perméabilité de l'inclusion semi-perméable);

L = 2 km (largeur de la nappe);

V_d = 10^{-6} m.s⁻¹ (vitesse de Darcy);

Δx = 100 m (pas d'espace);

l = 100 m et 300 m (largeur de l'inclusion semi-perméable).

Les figures AI-6 et AI-7 montrent les solutions numériques du problème. On notera que pour une largeur l de 100 m, la barrière semi-perméable est représentée par un seul point de calcul, alors que pour une largeur de 300 m, elle est représentée par trois points.

On peut conclure comme suit:

- la méthode d'estimation par la moyenne harmonique suit exactement la solution analytique, ce qui est normal, puisqu'elle est conçue spécifiquement dans le but de représenter sur un point la discontinuité des milieux physiques: les flux et les gradients à l'interface des points de calcul sont correctement estimés; en effet, lorsque $K_i \ll K_{i+1}$, on a:

$$K_{i+1/2} \cong K_i \quad (A1.42.a)$$

ce qui est représentatif de la situation physique, puisqu'au point i, le gradient de charge est déterminé principalement par la faible valeur de la conductivité K_i.

- les estimations par moyennes arithmétiques et géométrique tendent à sous-estimer les gradients, car elles tendent à surestimer la conductivité aux interfaces des points de calcul. En effet, lorsque $K_i \ll K_{i+1}$, on a:

$$K_{i+1/2} \cong \frac{K_{i+1}}{2} \quad (\text{moyenne arithmétique}) \quad (A1.42.b)$$

$$K_{i+1/2} \cong \sqrt{K_i K_{i+1}} \quad (\text{moyenne géométrique}) \quad (A1.42.c)$$

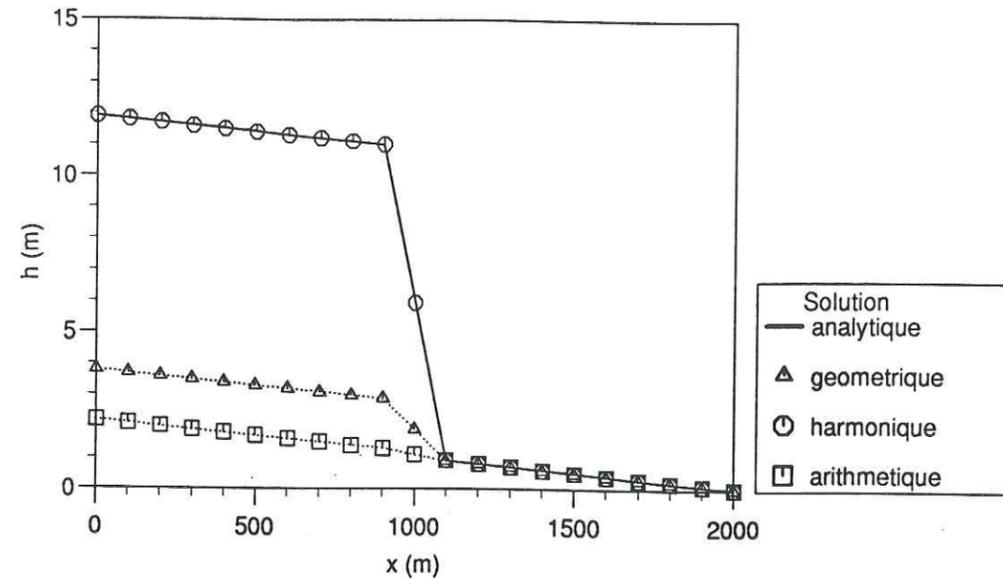


Figure AI-6: comparaison des effets des méthodes d'estimation pour une largeur $l = 100$ m

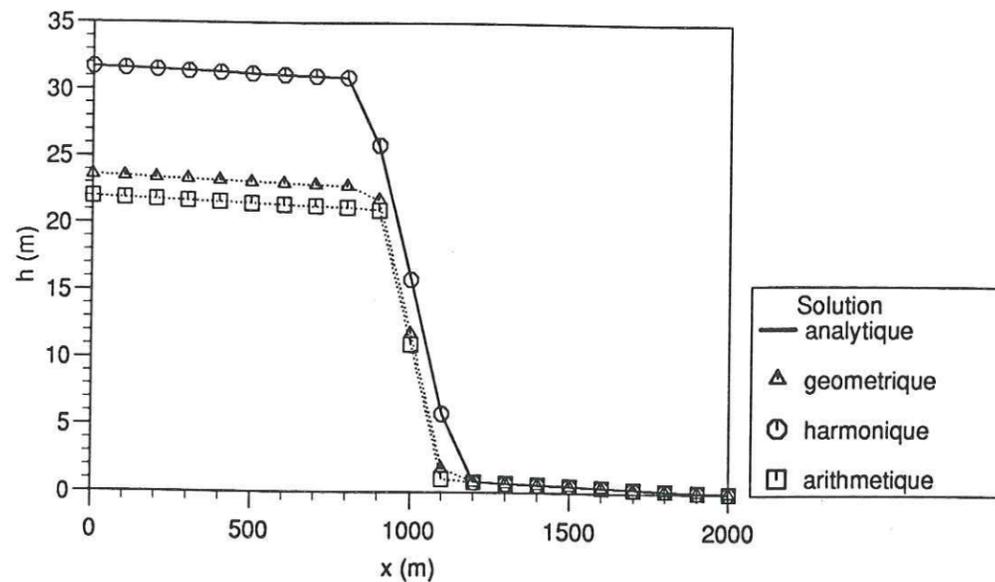


Figure AI-7: comparaison des effets des méthodes d'estimation pour une largeur $l = 300$ m

- les schémas ne tenant pas compte de la discontinuité de la dérivée de la charge à l'interface entre deux milieux différents demandent un plus grand nombre de points de calcul que les schémas capables de prendre en compte cette discontinuité: on constate que sur la figure AI-7, bien que l'inclusion semi-perméable soit représentée par trois points de calcul, le gradient de charge donné par les méthodes de moyennes arithmétique et géométrique reste sous-estimé d'environ 20 % par rapport à la solution analytique. En revanche, le schéma faisant appel à la moyenne harmonique suit la

solution analytique même lorsque la discontinuité est représentée par un seul point de calcul. On comprend ainsi aisément qu'il soit fréquemment adopté par les concepteurs de logiciels de simulation d'écoulements en aquifère, soucieux de prendre en compte de nombreuses discontinuités géologiques par un nombre de mailles restreint (pour des raisons d'économie de temps de calcul).

- bien que les opérateurs discrétisés suivant les trois modes d'estimation aient tous des erreurs de troncature d'ordre 2 par rapport à l'espace, on constate expérimentalement que les solutions numériques données par chacun d'eux sont très différentes. On reprendra donc la conclusion de Vaucelin et al. (1979): Des opérateurs ayant des erreurs de troncature de même ordre ne présentent pas forcément des erreurs numériques identiques.

AI-3. CONCLUSION GENERALE

A la lumière des considérations théoriques et expérimentales développées dans les paragraphes précédents, on arrive aux conclusions suivantes:

Vaucelin et al. (1979) ont montré que, dans le cadre d'une résolution en différences finies des équations de l'écoulement en zone non saturée, la méthode d'estimation par la moyenne géométrique fournissait la meilleure approximation. Les estimations par moyennes harmonique ou arithmétique conduisent à des résultats semblables, bien que moins précis.

Dans le cas des écoulements en aquifère, la moyenne harmonique donne des résultats satisfaisants dans la plupart des configurations, en particulier lorsque des discontinuités de propriétés hydrauliques doivent être prises en compte sur un nombre de mailles restreint. Ceci justifie l'adoption de cette méthode par la plupart des modélisateurs.

Enfin, les expérimentations numériques effectuées ici (en particulier § AI-2.2.1.) montrent qu'un utilisateur de modèles mathématiques doit posséder des notions de base en analyse numérique, ainsi qu'une connaissance suffisante des schémas numériques intégrés aux outils qu'il utilise. En effet, il ne faut pas perdre de vue que, de même qu'un modèle n'est pas la réalité, les solutions données par les algorithmes de calcul ne sont pas les solutions exactes des problèmes mathématiques posés aux outils de modélisation: la critique d'une modélisation passe aussi par celle de la pertinence numérique des résultats.

ANNEXE II
VALIDATION DU MODELE MIKE SHE DU BASSIN
DU GRAND MORIN (REGION PARISIENNE)

En raison du grand nombre de figures nécessaires à la discussion de la validation du modèle MIKE SHE du bassin du Grand Morin (cf. § II-5.), nous avons choisi de faire figurer celles-ci dans la présente annexe.

AII-1. METHODES ET CRITERES D'EVALUATION

AII-1.1. Méthodes d'évaluation de la qualité d'un ajustement de paramètres

La qualité d'un ajustement peut être évaluée suivant deux types d'approche: une approche qualitative et une approche statistique (Kauark-Leite, 1990; Loague and Green, 1991). L'approche qualitative consiste en une présentation graphique de l'ajustement des valeurs simulées aux valeurs observées; l'approche statistique porte sur la caractérisation des propriétés statistiques des variables mesurée et simulée.

AII-1.1.1. Approche qualitative

Nous utiliserons par la suite la notation suivante: étant donnée une variable Y sur laquelle on procède à l'évaluation de l'ajustement. Nous désignerons par Y_{mes} la variable mesurée et par Y_{sim} la variable simulée par le modèle. Les graphiques suivants sont présentés ici:

- les valeurs observées et simulées en fonction du temps. Bien que ce type de graphique permette une évaluation facile de la qualité de l'ajustement, il peut être parfois trompeur, l'appréciation et la comparaison visuelle de séries temporelles restant très subjectives. C'est pourquoi on a recours à d'autres graphiques:
- l'erreur de simulation en fonction du temps $(Y_{sim} - Y_{mes}) = f(t)$. On peut ainsi évaluer la stationnarité des écarts entre simulation et mesure par rapport au temps. On peut alors cerner une éventuelle erreur systématique saisonnière, etc...

- l'erreur cumulée en fonction du temps $Y_{err}(t) = \int_0^t (Y_{sim} - Y_{mes})(\tau) d\tau$, ou son résidu cumulé en fonction du temps $Y_{err}^{res}(t) = Y_{err}(t) - Y_{err}^{moyen}$. On détermine par ce moyen une éventuelle saisonnalité dans les variations de l'erreur;
- l'erreur de simulation en fonction de la variable mesurée $(Y_{sim} - Y_{mes}) = f(Y_{mes})$. La stationnarité est alors évaluée par rapport à la variable mesurée. On peut ainsi mettre en évidence une erreur systématique pour certaines plages de la variable mesurée;
- le cumul du résidu de l'erreur en fonction du cumul du résidu de la variable observée: on détermine ainsi d'éventuelles erreurs systématiques dans la simulation;

AII-1.1.2. Approche statistique

On s'intéresse ici à la structure probabiliste des variables examinées.

- fonction de distribution des variables mesurée et simulée. La caractérisation de ces fonctions permet de déterminer dans une certaine mesure la structure temporelle des variables examinées. On peut grâce à cette représentation mettre en évidence des erreurs systématiques pour certaines plages de variation de la variable observée;
- moyenne et écart-type des variables mesurée et simulée. On peut par exemple vérifier, par le biais de la moyenne, que des *bilans* hydrologiques sont respectés. L'écart-type fournit une indication du comportement *dynamique* de la variable;
- coefficient de variation du résidu des erreurs:

$$CV = \frac{1}{Y_{mes}^{moyen}} \left(\frac{\sum (Y_{sim} - Y_{mes})^2}{n} \right)^{1/2} \quad (AII.1)$$

ce coefficient décrit l'erreur relative (par rapport à la variable mesurée moyenne) associée à la simulation. Ce coefficient est toutefois très sensible à un écart entre les moyennes des variables simulée et observée;

- coefficient d'efficacité de l'ajustement:

$$CE = 1 - \frac{\sum (Y_{sim} - Y_{mes})^2}{\sum (Y_{mes} - Y_{mes}^{moyen})^2} \quad (AII.2)$$

encore appelé "critère de NASH", ce coefficient compare les erreurs données par la simulation et une seconde modélisation, plus simple, qui consisterait à adopter une variable simulée constante, égale à la valeur mesurée moyenne. Pour un ajustement parfait, le coefficient d'efficacité est égal à 1. Pour une modélisation "neutre" (lorsque la modélisation ne se révèle pas meilleure que d'adopter la valeur moyenne mesurée), ce coefficient vaut 0. Pour une modélisation très mauvaise, il est négatif, pouvant aller jusque $-\infty$.

L'inconvénient des méthodes statistiques par rapport aux méthodes qualitatives est qu'elles demandent des séries temporelles importantes (pour la simulation comme pour l'observation), données qui ne sont pas toujours disponibles lorsqu'une modélisation est entreprise.

AII-1.2. Résultats présentés

Nous présentons dans les pages suivantes les résultats de réglage et de validation du modèle. Rappelons que le réglage s'est étendu sur la période comprenant les années 1987 à 1990 incluses et que la validation a trait aux années 1984 à 1986 incluses.

La validation porte sur quatre modélisations différentes (cf. § II-5.2.2., II-5.2.3. et II-5.3.1.):

- la modélisation avec le modèle réglé (cf. § II-5.2.2.);
- les deux modélisations ayant trait à l'étude de sensibilité aux paramètres de l'aquifère de Champigny (cf. § II-5.2.3.). Ces deux simulations ont porté sur la modification des caractéristiques de l'aquifère de Champigny (conductivité hydraulique et porosité);
- la modélisation portant sur la sensibilité aux conditions initiales (cf. § II-5.3.1.).

Les résultats de ces simulations ont été évalués sur la base des méthodes décrites dans le paragraphe AII-1.1. Rappelons que le critère de validation adopté est le débit mesuré en rivière à la station de Pommeuse, sur le cours du Grand Morin. Le sous-bassin versant du Grand Morin à Pommeuse couvre 800 km², soit deux tiers de la superficie totale du bassin du Grand Morin: nous avons fait l'hypothèse que son comportement est représentatif du comportement du bassin entier du Grand Morin. Dans le cas où cette hypothèse est vérifiée, la validation portant sur le sous-bassin du Grand Morin à Pommeuse peut être étendue au modèle complet du bassin du Grand Morin. Bien que, selon De Marsily (1994), un tel raisonnement soit contestable, les données en notre possession ne permettent pas de mettre en oeuvre une approche plus rigoureuse.

AII-2. EVALUATION DU REGLAGE

AII-2.1. Evaluation qualitative

Les figures AII-1 à AII-7 illustrent la validation qualitative effectuée sur les débits mesurés. Pour chacune des quatre simulations sur la période 1984-1986, nous présentons les graphiques suivants:

- figures AII.1.a-b : débits simulés et mesurés en fonction du temps;
 figure AII.2 : erreurs absolue, relative et leurs résidus cumulés en fonction du temps;
 figure AII.3 : débits calculé, erreurs absolue et relative en fonction du débit mesuré; résidu cumulé du débit calculé en fonction du résidu cumulé du débit observé;

AII-2.2. Evaluation statistique

- figure AII.4 : Fonction de distribution des débits calculé et observé sur la période de réglage, ainsi que leurs propriétés statistiques;

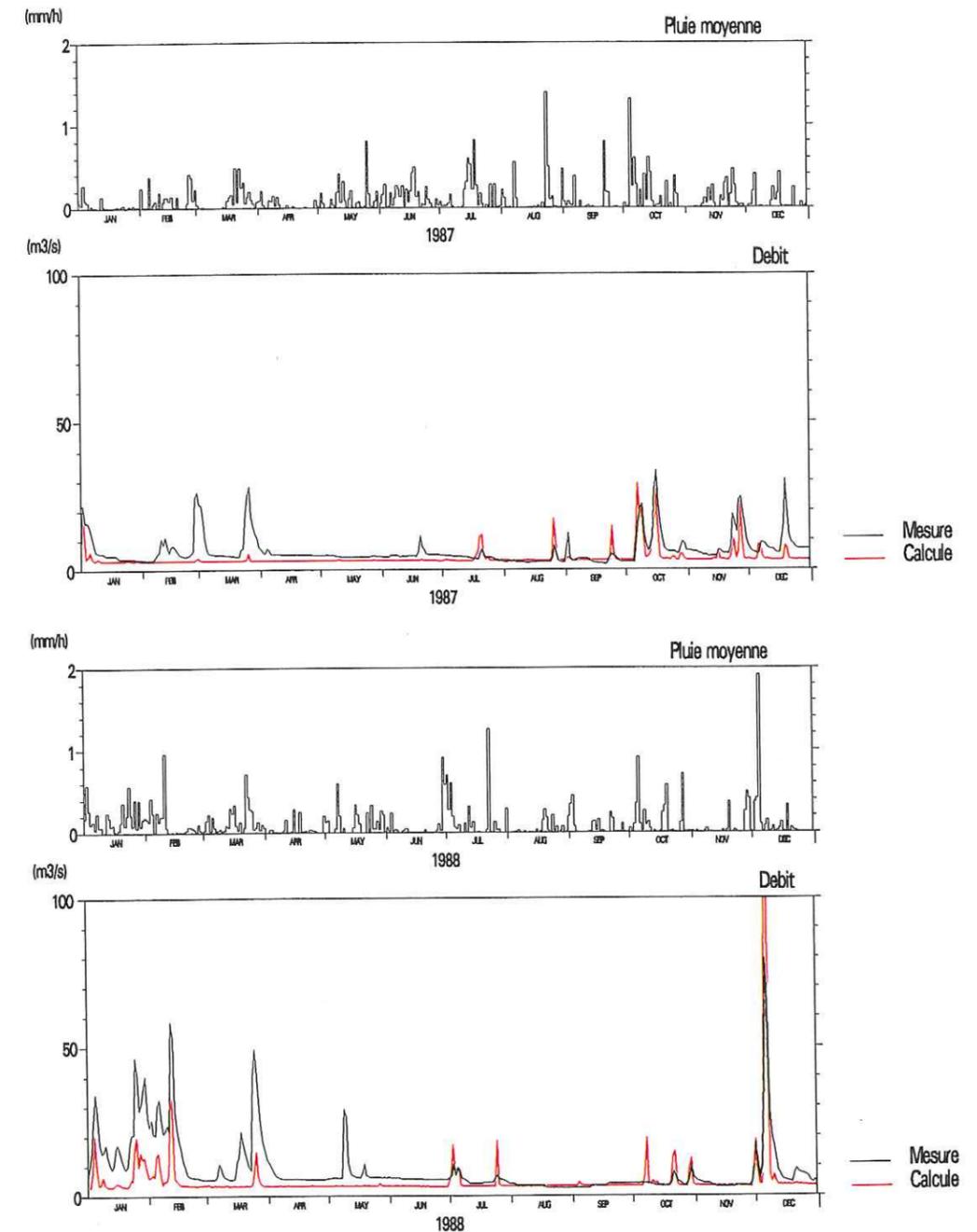


figure AII.1.a: débits simulés et mesurés à Pommeuse en fonction du temps
 (années 1987-1988)

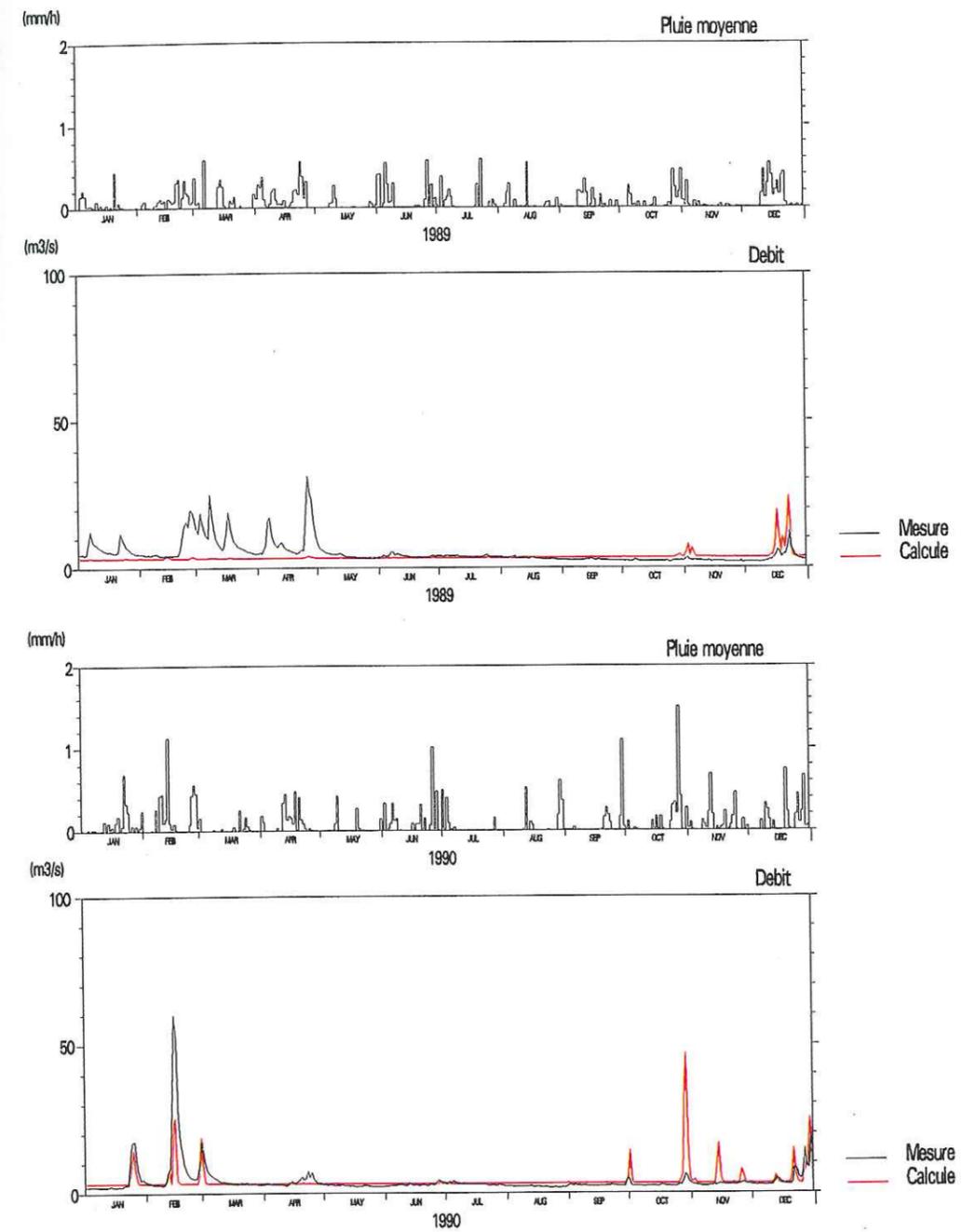


figure AII.1.b: débits simulés et mesurés à Pommeuse en fonction du temps

(années 1989-1990)

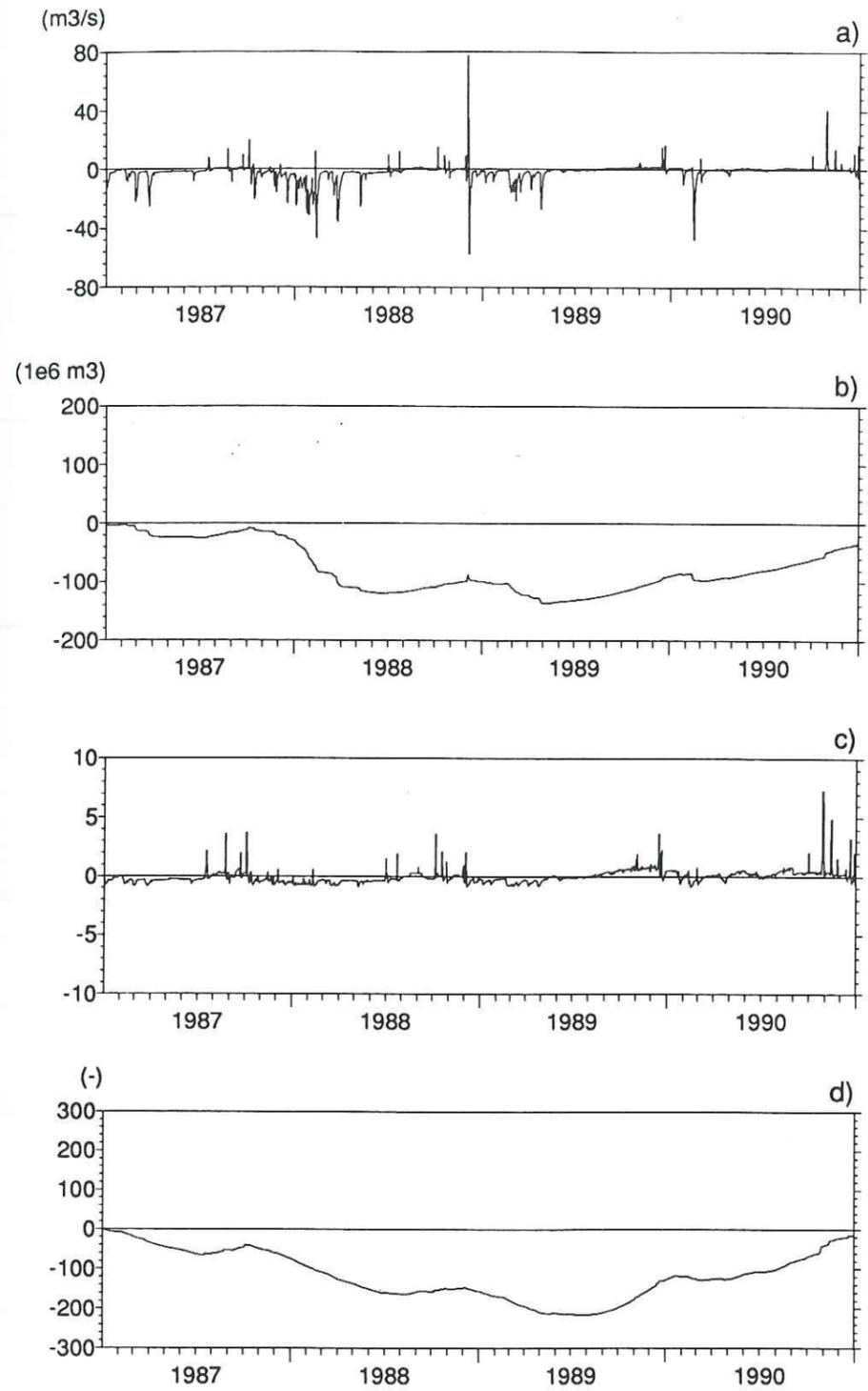


figure AII.2: erreurs absolue et relative sur les débits calculés

a. Erreur absolue en fonction du temps - b: cumul du résidu de l'erreur absolue en fonction du temps

c: erreur relative en fonction du temps - d: cumul du résidu de l'erreur relative en fonction du temps

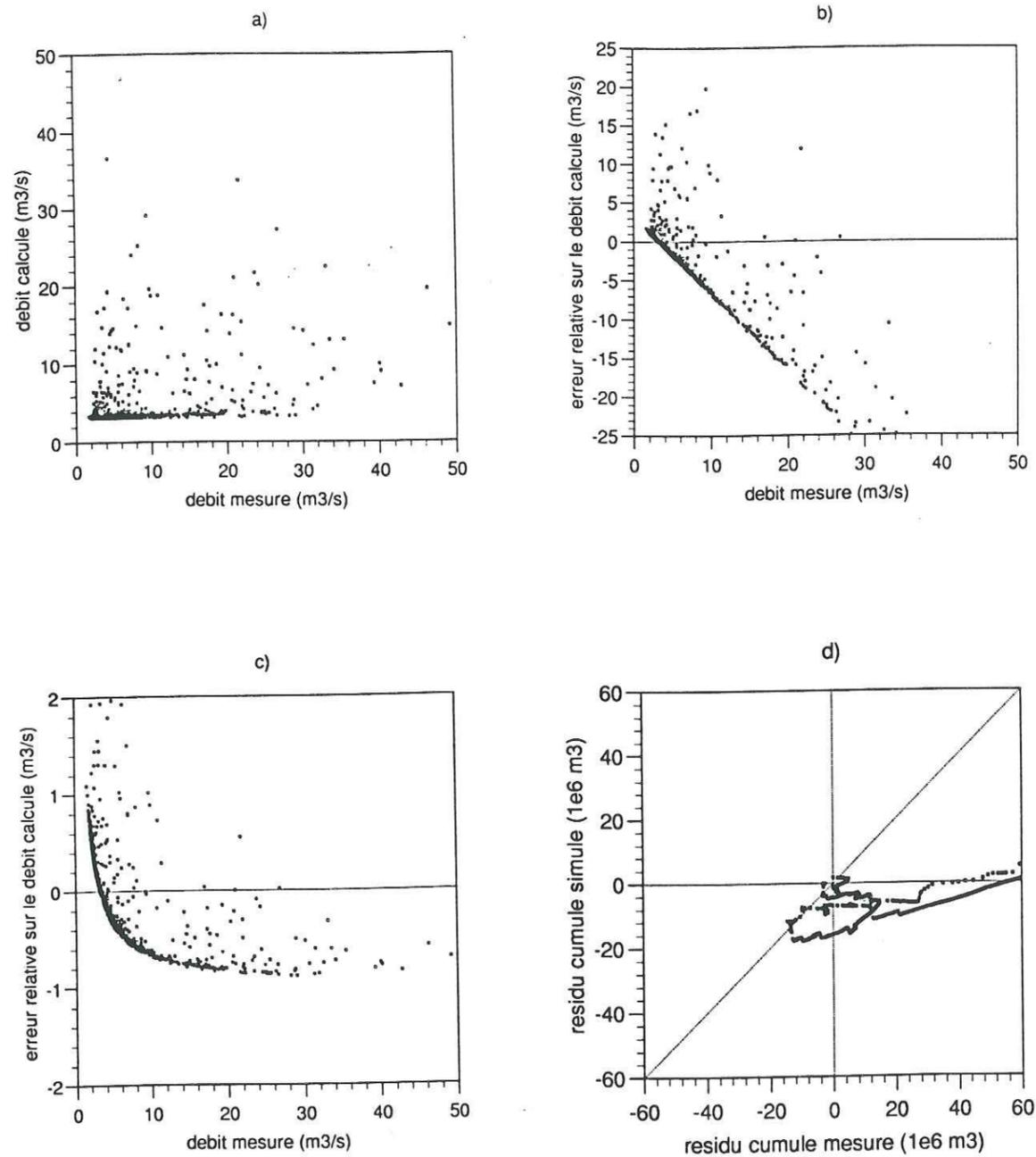


figure AII.3: débits calculés et erreurs de simulation en fonction des débits mesurés

a. débit calculé en fonction du débit mesuré - b: l'erreur absolue en fonction du débit mesuré

c: erreur relative en fonction du débit mesuré

d: cumul du résidu du débit calculé en fonction du résidu du débit mesuré

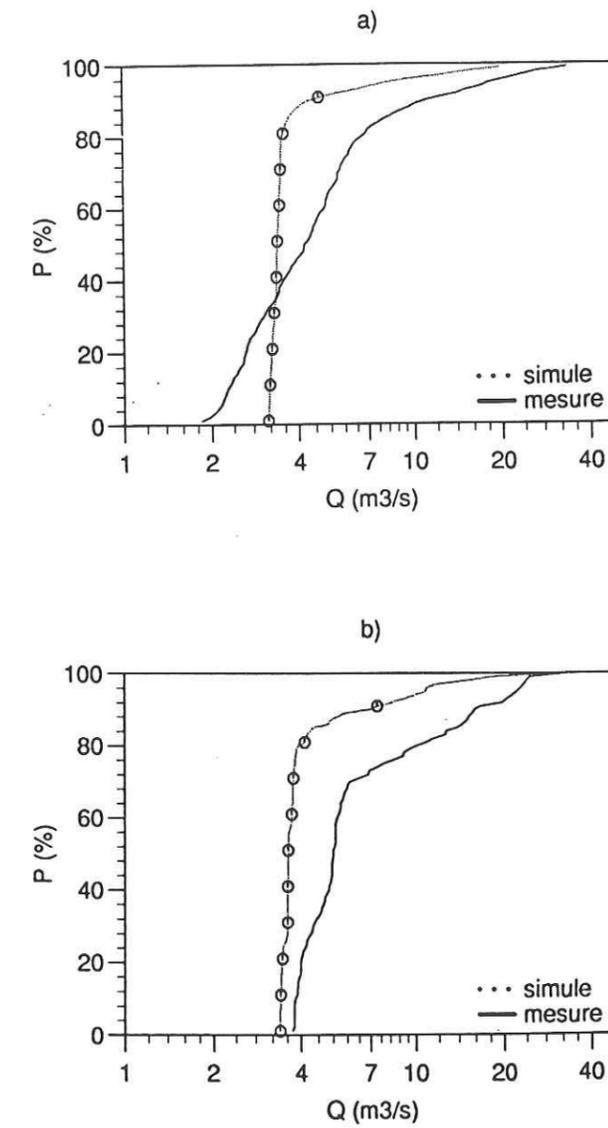


figure AII.4: fonction de distribution des débits mesuré et calculé à Pommeuse (période 1987-1990)

a: janvier-décembre; b: mois de janvier et février uniquement

	Moyenne ($m^3 \cdot s^{-1}$)	Ecart-type ($m^3 \cdot s^{-1}$)	Coefficient de variation	Coefficient d'efficacité
Mesuré 1987-1990	6,06	6,64	-	-
Calculé 1987-1990	4,27	5,15	1,07	$5,2 \cdot 10^{-2}$

Tableau AII.1: Propriétés statistiques des débits mesurés et simulés à Pommeuse (période 1987-1990)

AII-3. EVALUATION DE LA VALIDATION

AII-3.1. Evaluation qualitative

- figure AII.5 : débits calculé et mesuré en fonction du temps pour la simulation de référence (1984-1986);
- figure AII.6 : débits calculé et mesuré en fonction du temps pour la simulation avec modification de la conductivité hydraulique dans l'aquifère de Champigny (1984-1986);
- figure AII.7 : débits calculé et mesuré en fonction du temps pour la simulation avec modification de porosité dans l'aquifère de Champigny (1984-1986);
- figure AII.8 : débits calculé et mesuré en fonction du temps pour la simulation de reprise (1984-1986);
- figure AII.9 : erreurs absolue, relative et leurs résidus cumulés en fonction du temps pour le modèle de référence (1984-1986);
- figure AII.10 : erreurs absolue, relative et leurs résidus cumulés en fonction du temps pour le modèle avec modification de la conductivité hydraulique dans l'aquifère de Champigny (1984-1986);
- figure AII.11 : erreurs absolue, relative et leurs résidus cumulés en fonction du temps pour le modèle avec modification de la porosité dans l'aquifère de Champigny (1984-1986);
- figure AII.12 : erreurs absolue, relative et leurs résidus cumulés en fonction du temps pour la simulation de reprise (1984-1986);
- figure AII.13 : Débit calculé, erreurs absolue et relative sur le débit calculé en fonction du débit mesuré, cumul des résidus du débit calculé en fonction du cumul des résidus sur le débit mesuré - modèle de référence;
- figure AII.14 : Débit calculé, erreurs absolue et relative sur le débit calculé en fonction du débit mesuré, cumul des résidus du débit calculé en fonction du cumul des résidus sur le débit mesuré - modèle avec modification de la conductivité hydraulique dans l'aquifère de Champigny;
- figure AII.15 : Débit calculé, erreurs absolue et relative sur le débit calculé en fonction du débit mesuré, cumul des résidus du débit calculé en fonction du cumul des résidus sur le débit mesuré - modèle avec modification de la porosité de l'aquifère de Champigny;

- figure AII.16 : Débit calculé, erreurs absolue et relative sur le débit calculé en fonction du débit mesuré, cumul des résidus du débit calculé en fonction du cumul des résidus sur le débit mesuré - simulation de reprise.

AII-3.2. Evaluation statistique

- figure AII.17 : Fonction de distribution et propriétés statistiques des débits calculé et observé pour le modèle de référence;
- figure AII.18 : Fonction de distribution et propriétés statistiques des débits calculé et observé pour le modèle avec modification de la conductivité hydraulique de l'aquifère de Champigny;
- figure AII.19 : Fonction de distribution et propriétés statistiques des débits calculé et observé pour le modèle avec modification de la porosité de l'aquifère de Champigny;
- figure AII.20 : Fonction de distribution et propriétés statistiques des débits calculé et observé pour la simulation de reprise;

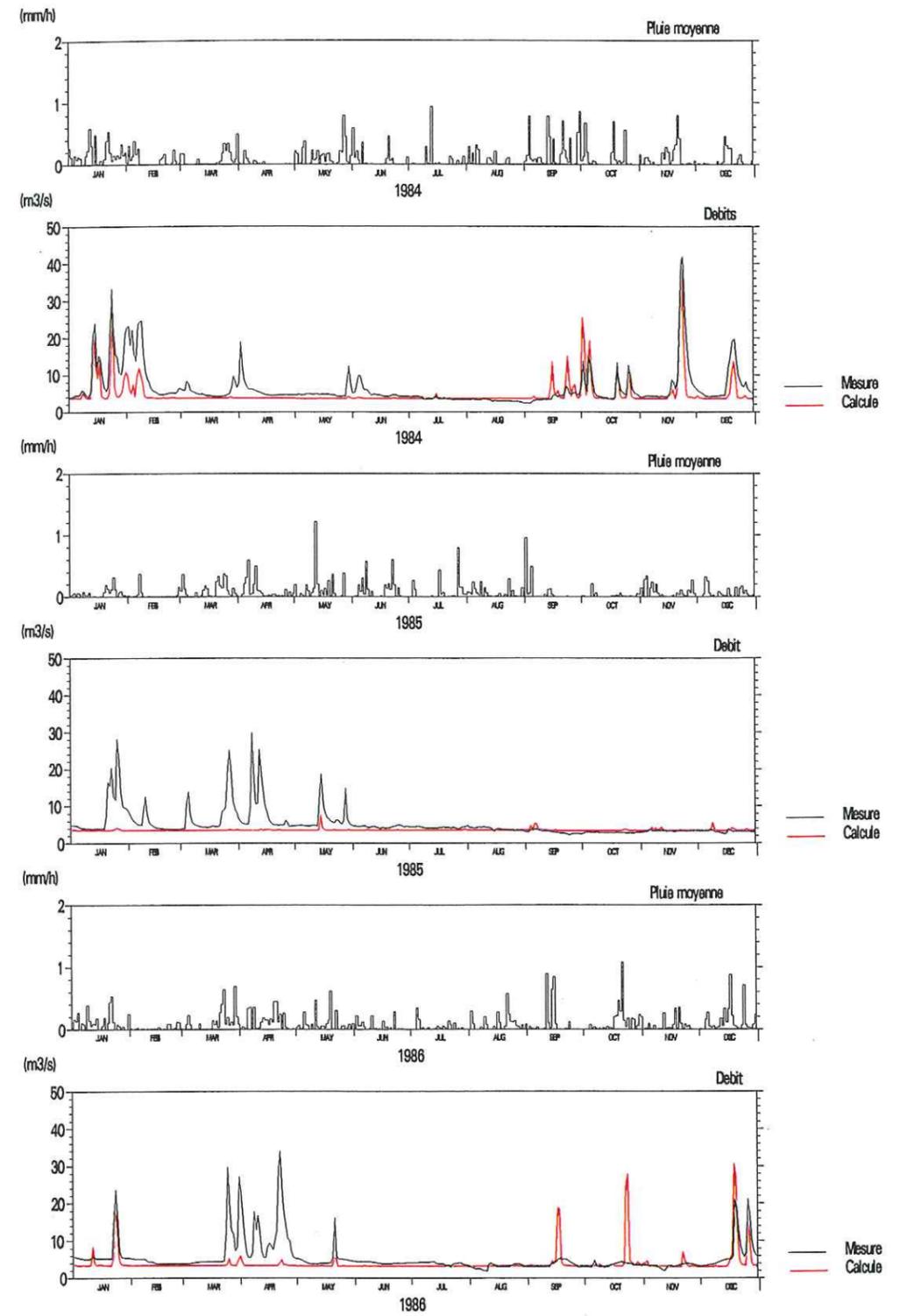


figure AII.5: débits calculé et mesuré à Pommeuse en fonction du temps (modèle de référence)

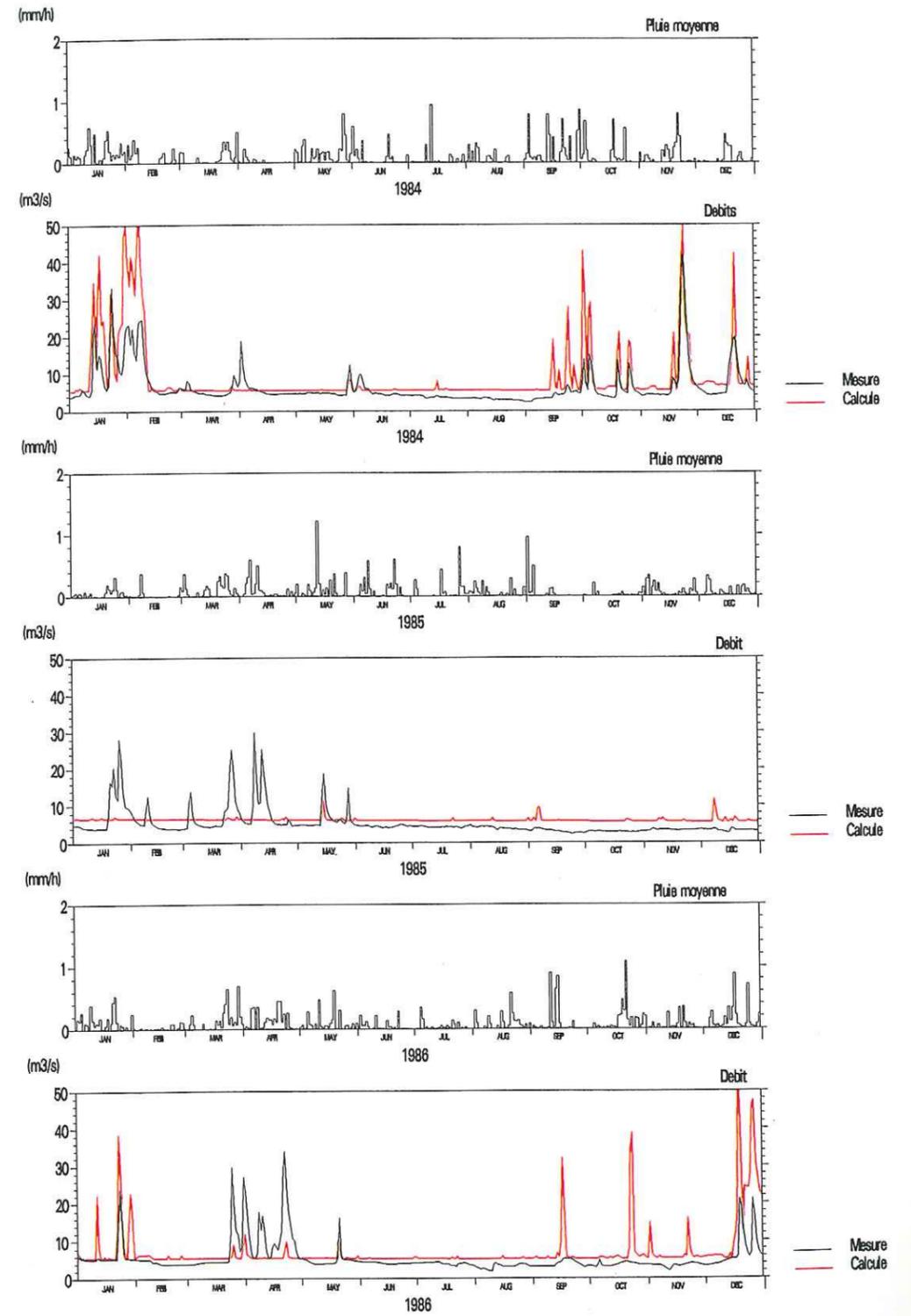


figure AII.6: débits calculé et mesuré à Pommeuse en fonction du temps (modèle avec modification de la conductivité hydraulique de l'aquifère de Champigny)

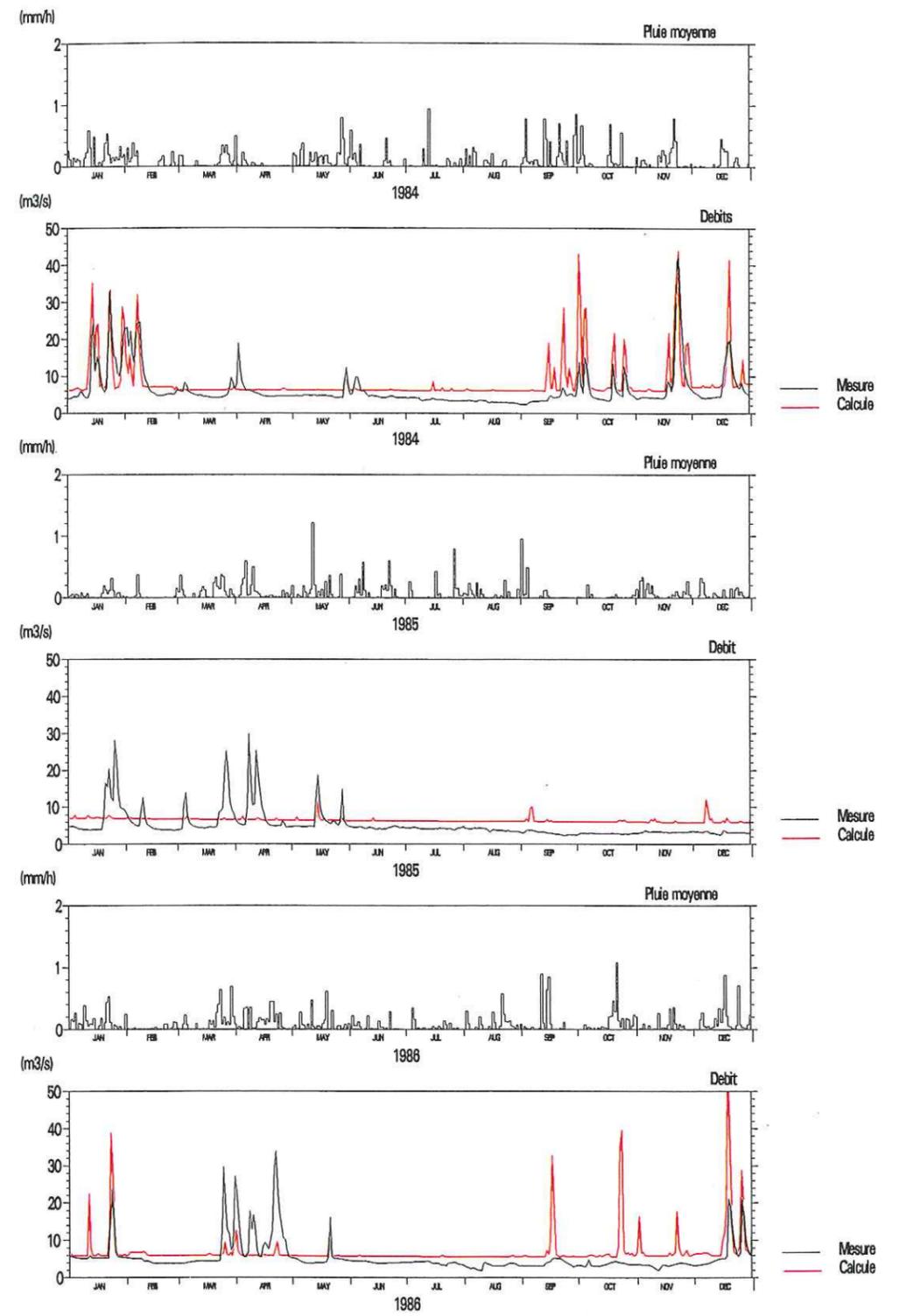


figure AII.7: débits calculé et mesuré à Pommeuse en fonction du temps (modèle avec modification de la porosité de l'aquifère de Champigny)

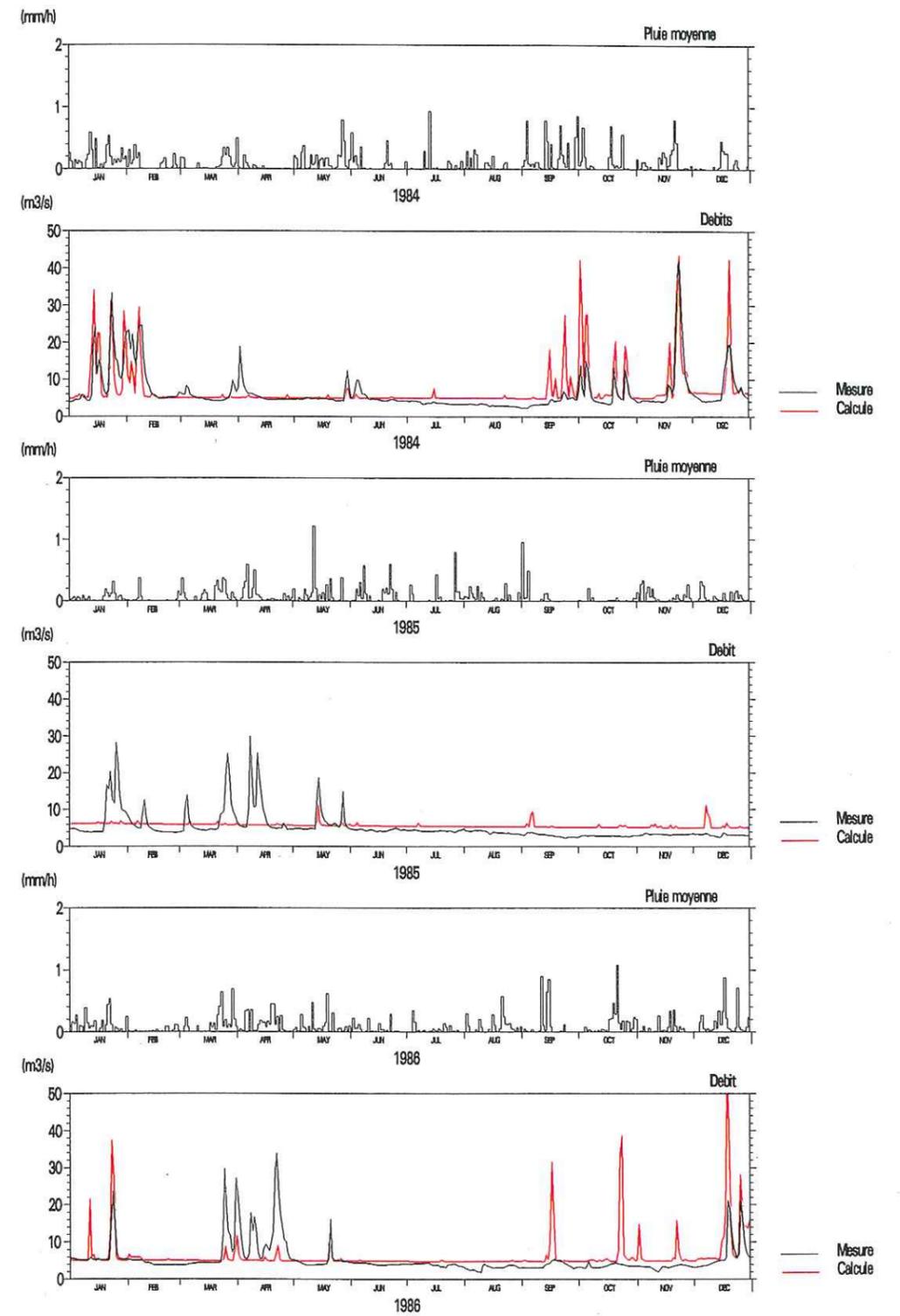


figure AIII.8: débits calculé et mesuré à Pommeuse en fonction du temps (simulation de reprise)

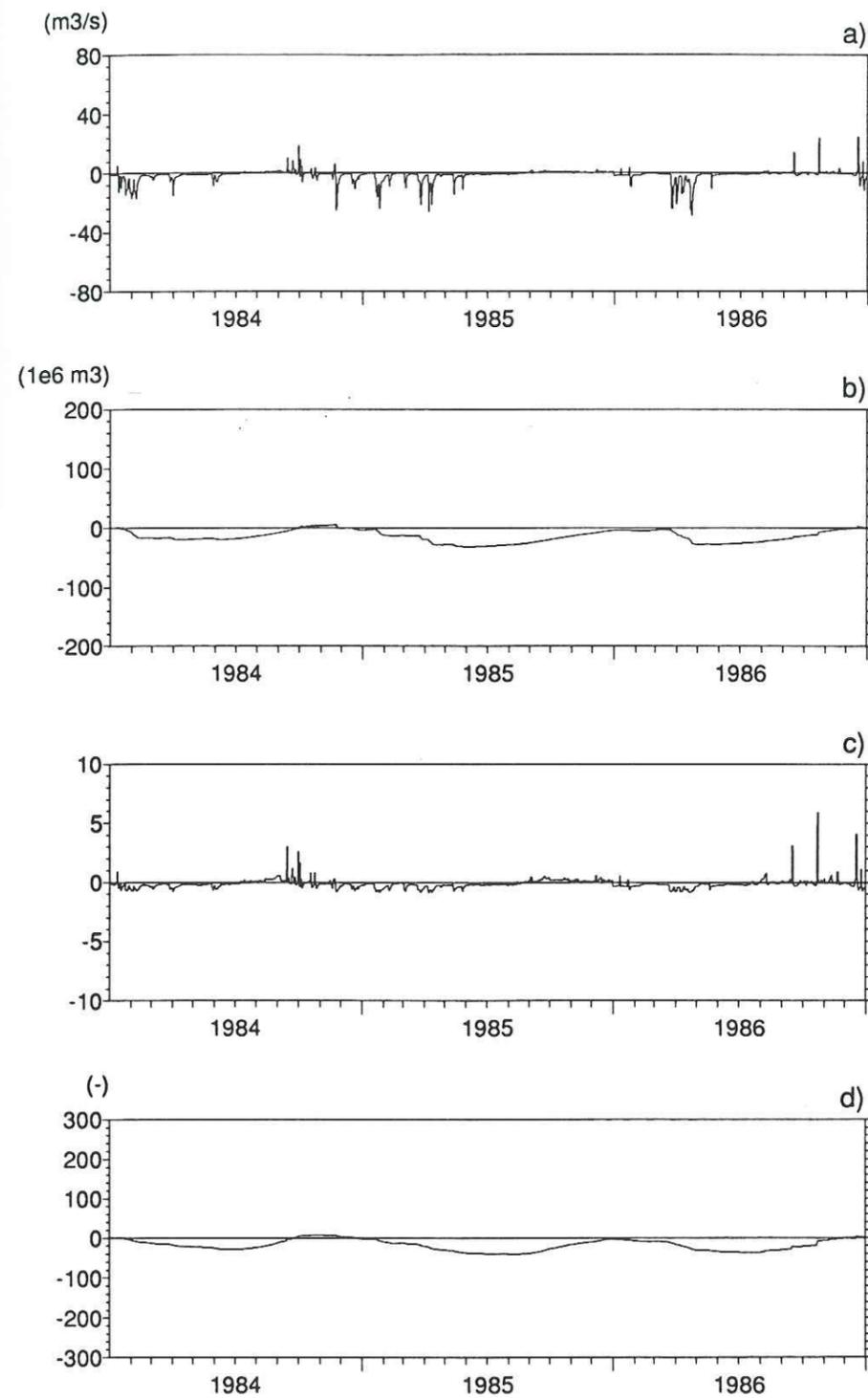


figure AIII.9: erreurs absolue et relative sur le débit calculé à Pommeuse (modèle de référence)

a. Erreur absolue en fonction du temps - b: cumul du résidu de l'erreur absolue en fonction du temps

c: erreur relative en fonction du temps - d: cumul du résidu de l'erreur relative en fonction du temps

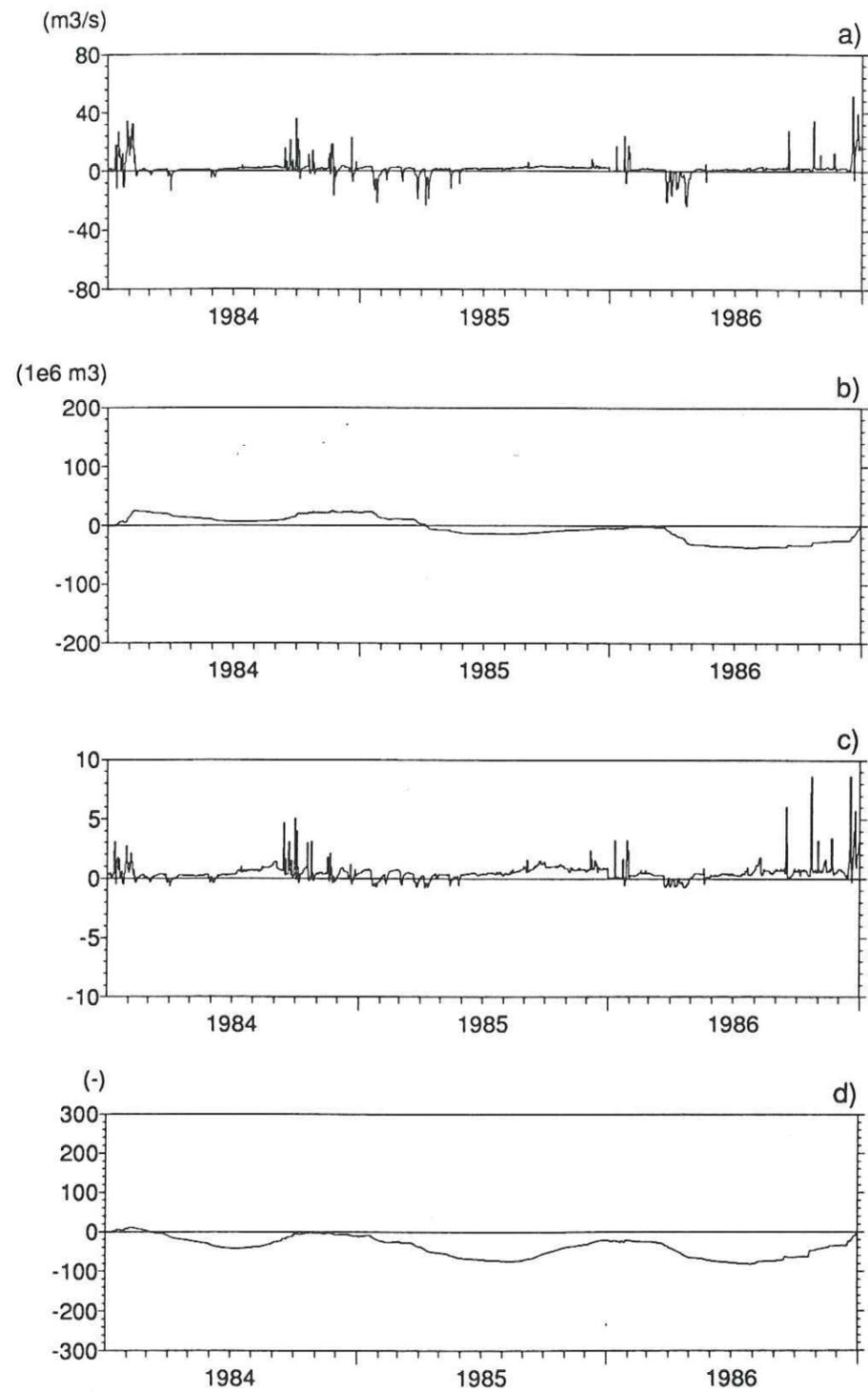


figure AIII.10: erreurs absolue et relative sur le débit calculé à Pommeuse (modèle avec modification de la conductivité hydraulique de l'aquifère de Champigny)

a. Erreur absolue en fonction du temps - b: cumul du résidu de l'erreur absolue en fonction du temps

c: erreur relative en fonction du temps - d: cumul du résidu de l'erreur relative en fonction du temps

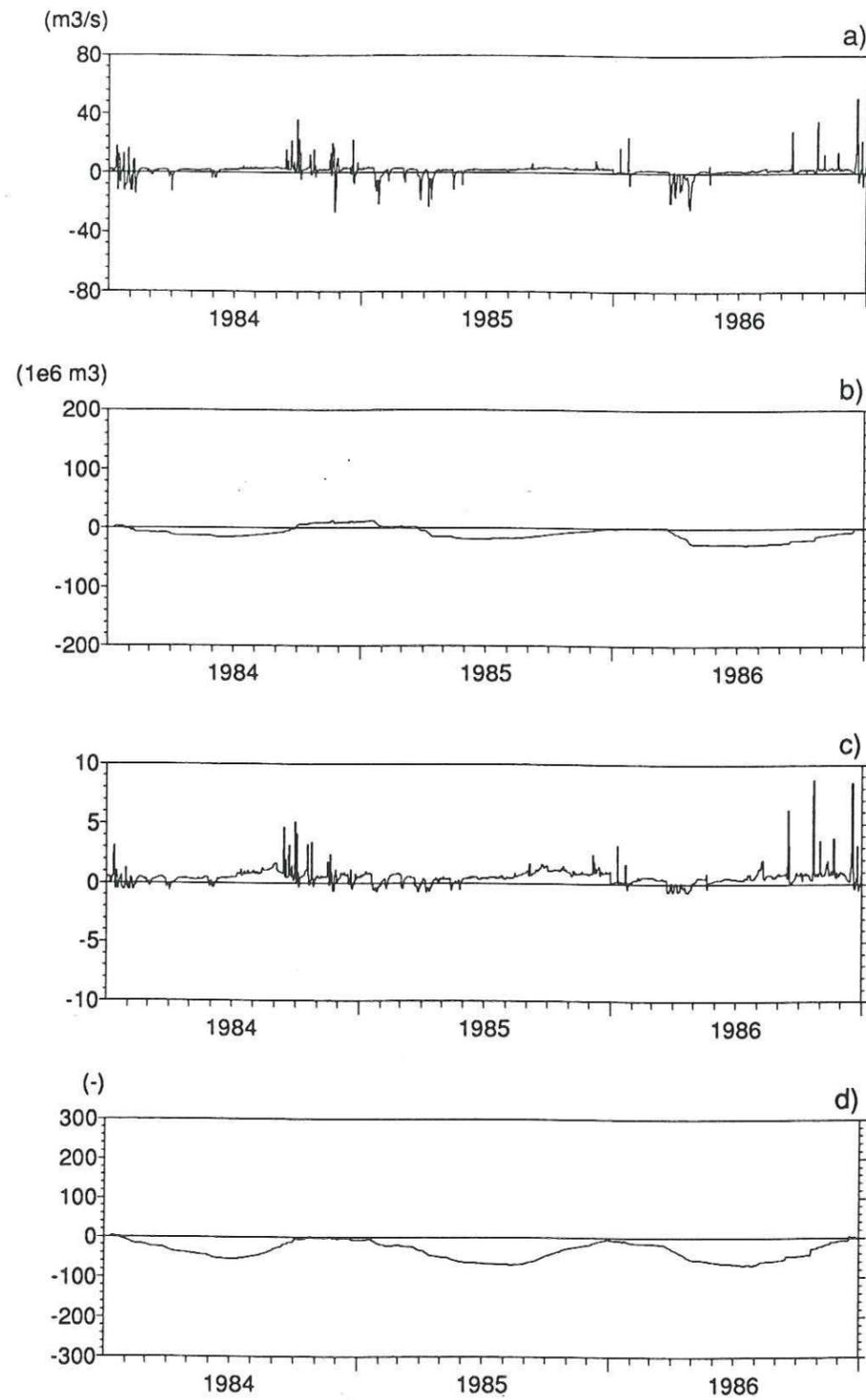


figure AIII.11: erreurs absolue et relative sur le débit calculé à Pommeuse (modèle avec modification de la porosité de l'aquifère de Champigny)

a. Erreur absolue en fonction du temps - b: cumul du résidu de l'erreur absolue en fonction du temps
c: erreur relative en fonction du temps - d: cumul du résidu de l'erreur relative en fonction du temps

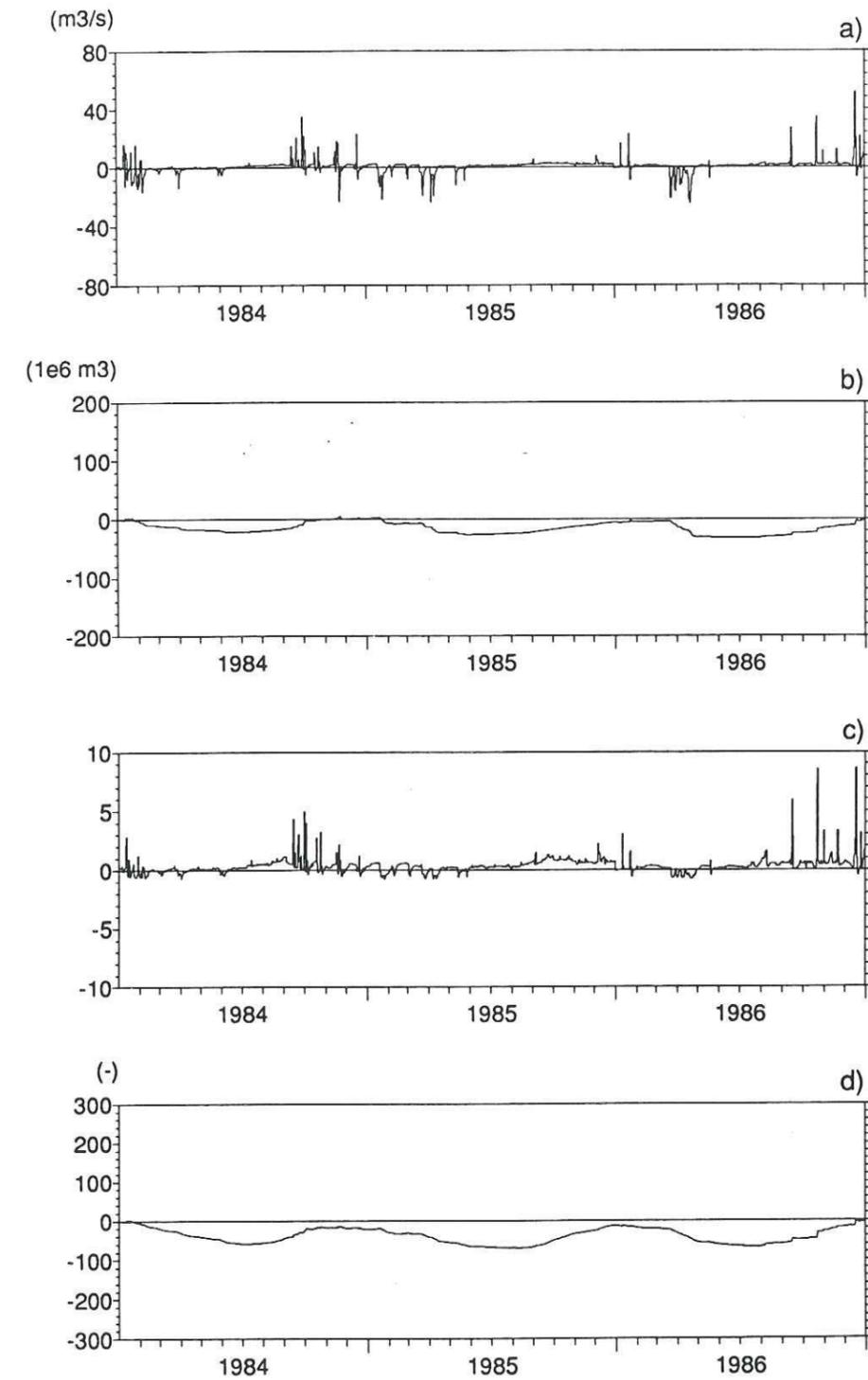


figure AIII.12: erreurs absolue et relative sur le débit calculé à Pommeuse (simulation de reprise)

a. Erreur absolue en fonction du temps - b: cumul du résidu de l'erreur absolue en fonction du temps
c: erreur relative en fonction du temps - d: cumul du résidu de l'erreur relative en fonction du temps

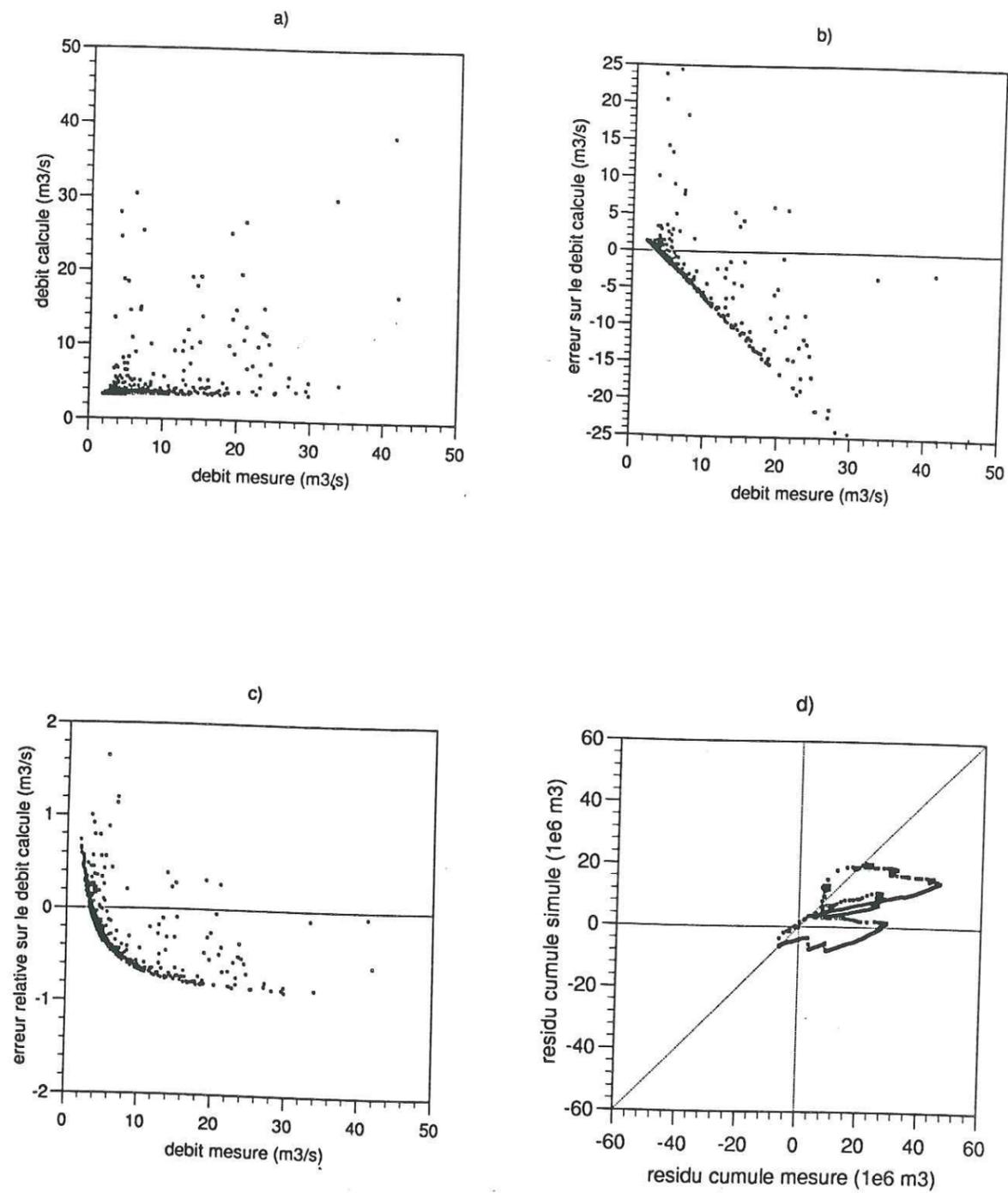


figure AII.13: débit calculé et erreurs en fonction du débit mesuré à Pommeuse (modèle de référence)

a. débit calculé en fonction du débit mesuré - b: erreur absolue sur le débit calculé en fonction du débit mesuré
 c: erreur relative sur le débit calculé en fonction du débit mesuré - d: résidu cumulé du débit calculé en fonction
 du résidu cumulé du débit mesuré.

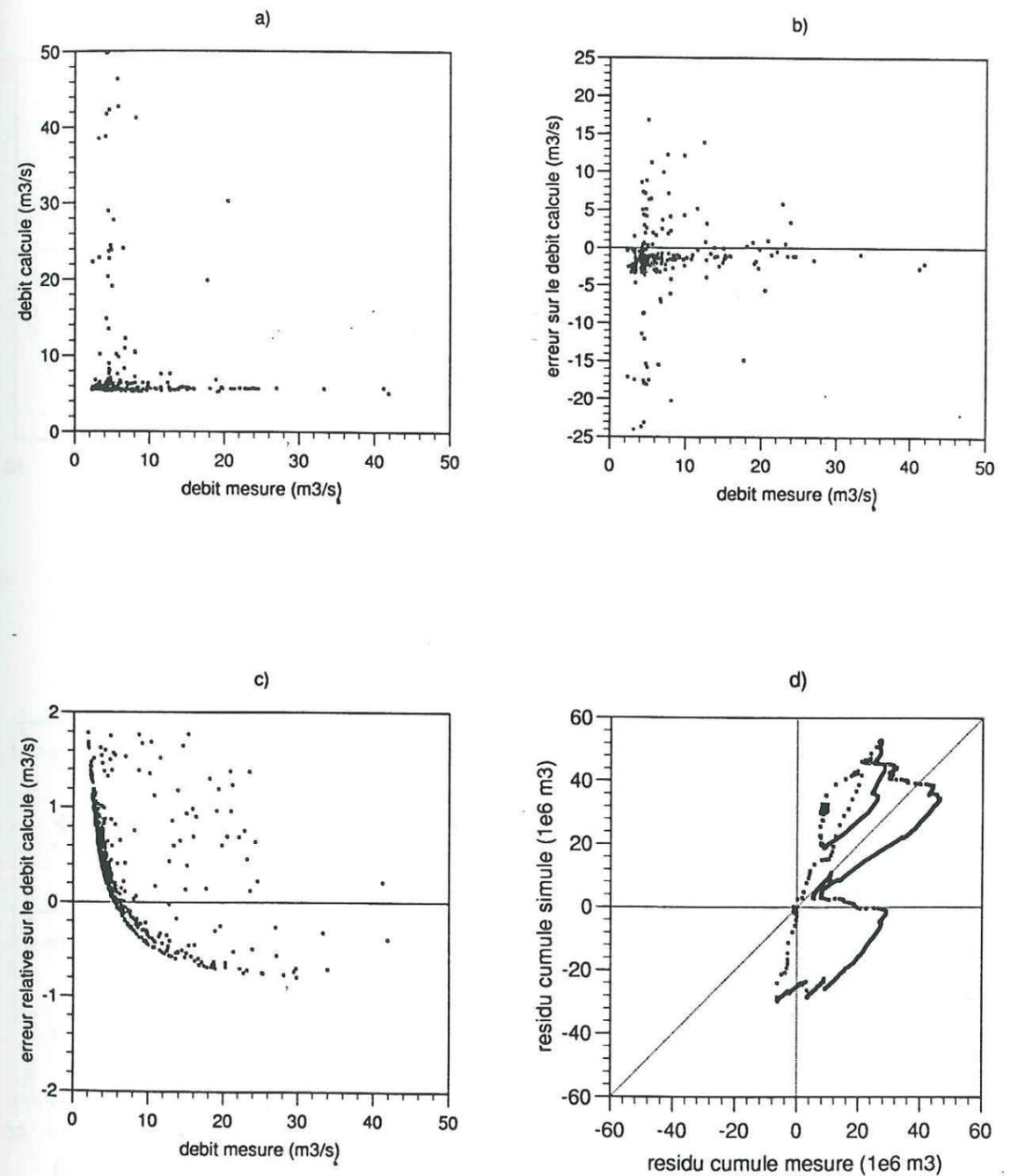


figure AII.14: débit calculé et erreurs en fonction du débit mesuré à Pommeuse (modèle avec modification de la conductivité hydraulique de l'aquifère de Champigny)

a. débit calculé en fonction du débit mesuré - b: erreur absolue sur le débit calculé en fonction du débit mesuré
 c: erreur relative sur le débit calculé en fonction du débit mesuré - d: résidu cumulé du débit calculé en fonction
 du résidu cumulé du débit mesuré.

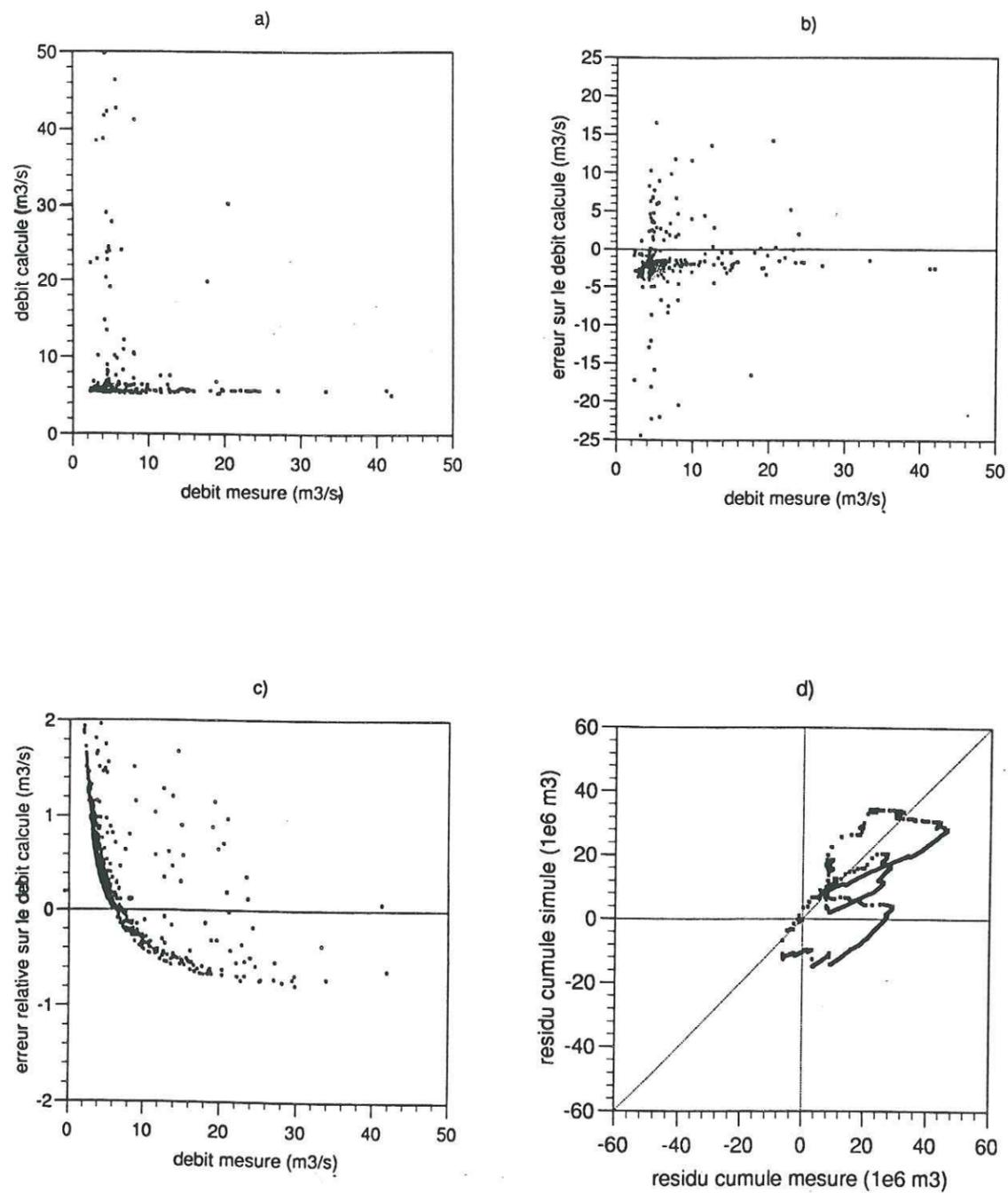


figure AII.15: débit calculé et erreurs en fonction du débit mesuré à Pommeuse (modèle avec modification de la porosité de l'aquifère de Champigny)

a. débit calculé en fonction du débit mesuré - b: erreur absolue sur le débit calculé en fonction du débit mesuré
c: erreur relative sur le débit calculé en fonction du débit mesuré - d: résidu cumulé du débit calculé en fonction du résidu cumulé du débit mesuré.

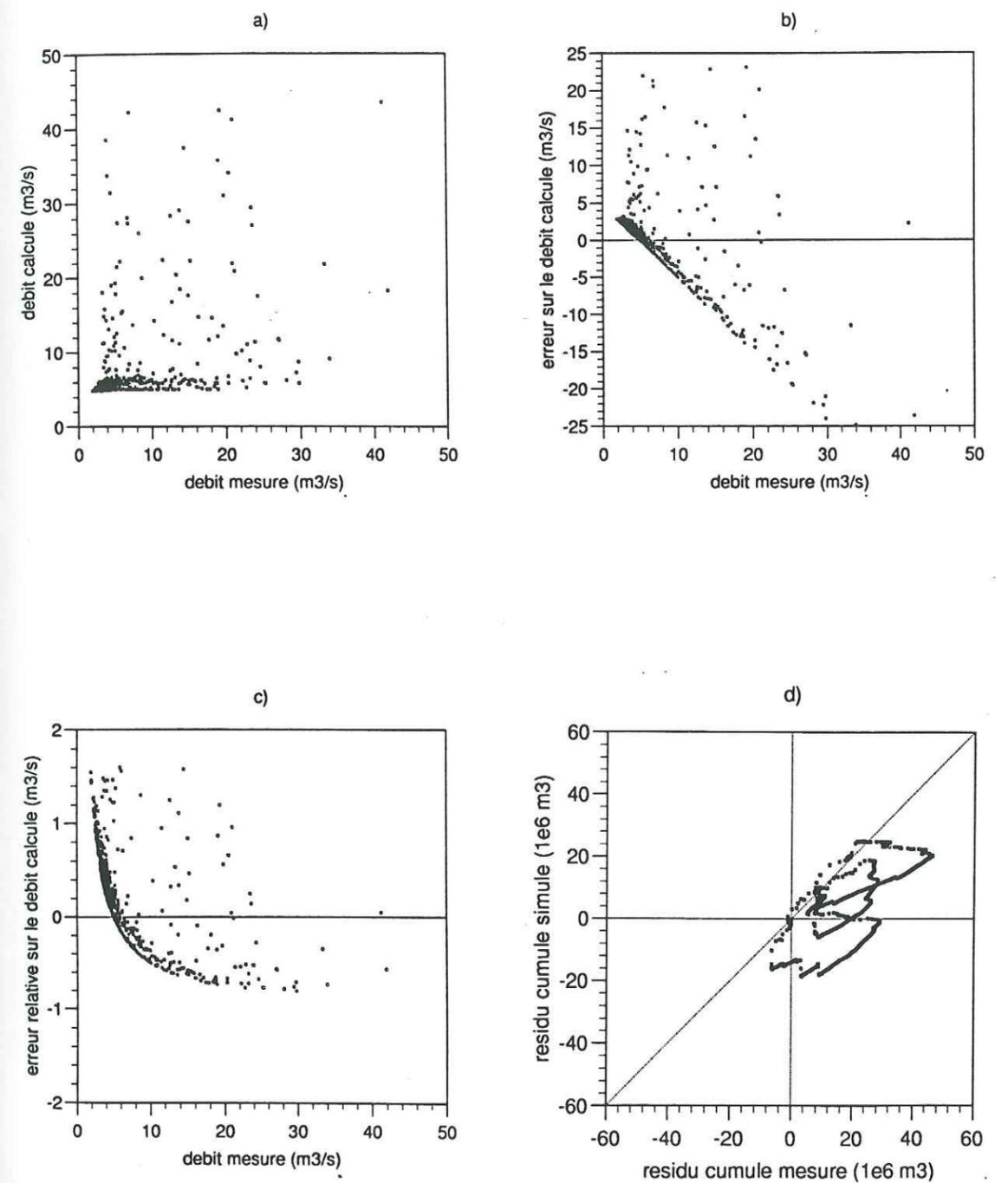


figure AII.16: débit calculé et erreurs en fonction du débit mesuré à Pommeuse (simulation de reprise)

a. débit calculé en fonction du débit mesuré - b: erreur absolue sur le débit calculé en fonction du débit mesuré
c: erreur relative sur le débit calculé en fonction du débit mesuré - d: résidu cumulé du débit calculé en fonction du résidu cumulé du débit mesuré.

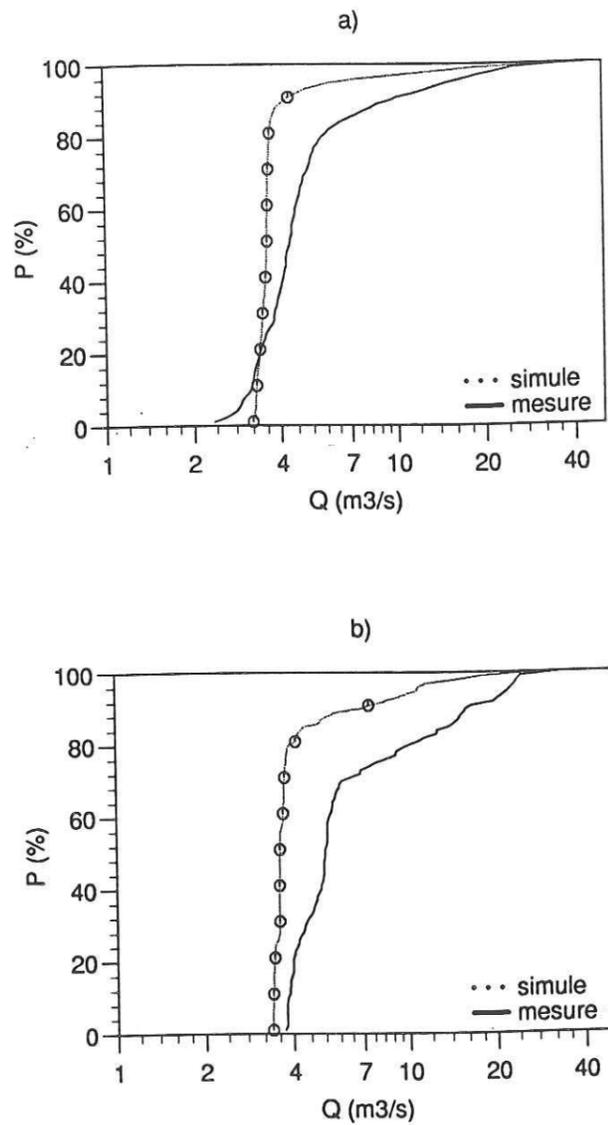


figure AIII.17: densité de probabilité des débits mesuré et simulé à Pommeuse (modèle de référence)

a: janvier-décembre; b: mois de janvier et février uniquement

	Moyenne (m ³ .s ⁻¹)	Ecart-type (m ³ .s ⁻¹)	Coefficient de variation	Coefficient d'efficacité
Mesuré janvier-décembre	5,6	4,5	-	-
Simulé janvier-décembre	4,1	2,8	0,77	6,8.10 ⁻²
Mesuré janvier-février	7,8	5,9	-	-
Simulé janvier-février	4,6	3,2	0,7	0,15

Tableau AIII.2: Propriétés statistiques des débits mesurés et simulés à Pommeuse (modèle de référence)

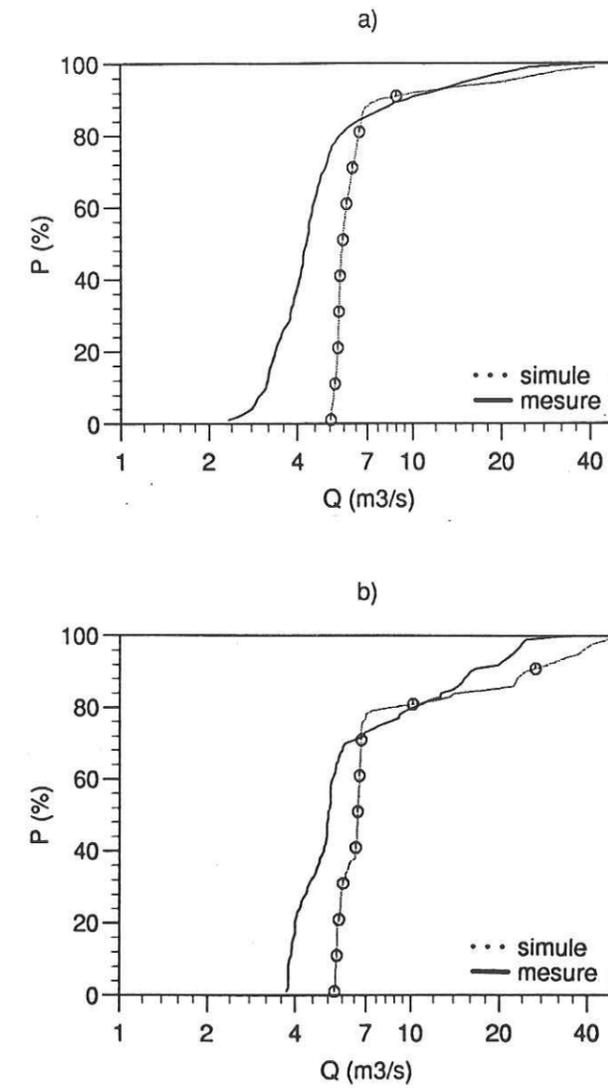


figure AIII.18: fonction de distribution des débits mesuré et simulé à Pommeuse (modèle avec modification de la conductivité hydraulique de l'aquifère de Champigny) - a: janvier-décembre; b: mois de janvier et février uniquement

	Moyenne (m ³ .s ⁻¹)	Ecart-type (m ³ .s ⁻¹)	Coefficient de variation	Coefficient d'efficacité
Mesuré janvier-décembre	5,6	4,5	-	-
Simulé janvier-décembre	7,5	6,4	1,05	-0,72
Mesuré janvier-février	7,5	5,9	-	-
Simulé janvier-février	10,6	10,2	1,05	-0,92

Tableau AIII.3: Propriétés statistiques des débits mesurés et simulés à Pommeuse (modèle avec modification de la conductivité hydraulique de l'aquifère de Champigny)

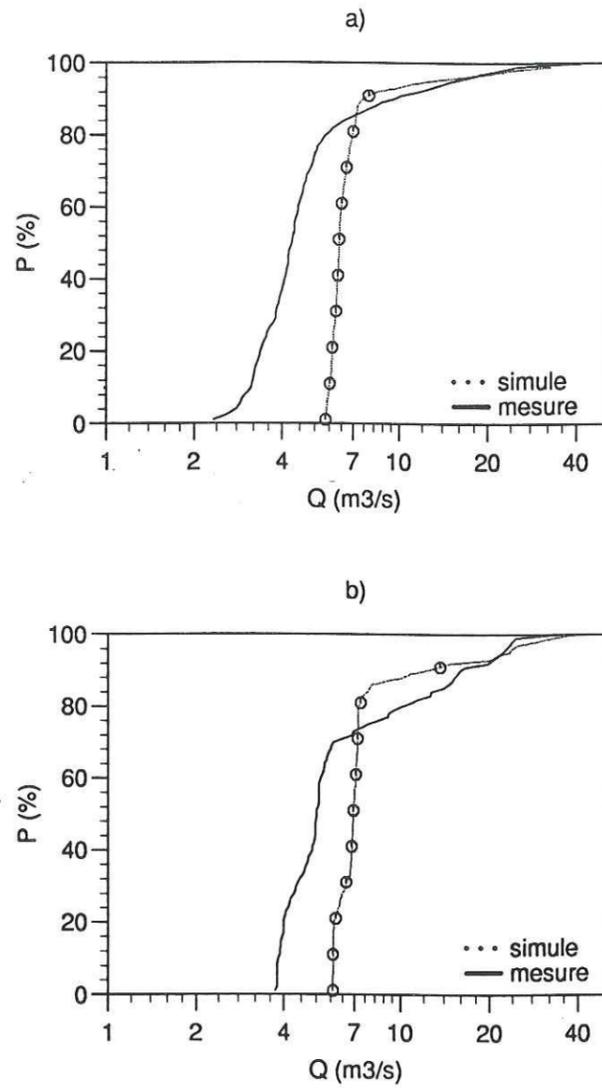


figure AIII.19: fonction de distribution des débits mesuré et simulé à Pommeuse (modèle avec modification de la porosité de l'aquifère de Champigny) - a: janvier-décembre; b: mois de janvier et février uniquement

	Moyenne ($m^3 \cdot s^{-1}$)	Ecart-type ($m^3 \cdot s^{-1}$)	Coefficient de variation	Coefficient d'efficacité
Mesuré janvier-décembre	5,6	4,5	-	-
Simulé janvier-décembre	7,4	4,6	0,93	-0,35
Mesuré janvier-février	7,8	5,9	-	-
Simulé janvier-février	8,6	5,7	0,72	0,12

Tableau AIII.4: Propriétés statistiques des débits mesurés et simulés à Pommeuse (modèle avec modification de la porosité de l'aquifère de Champigny)

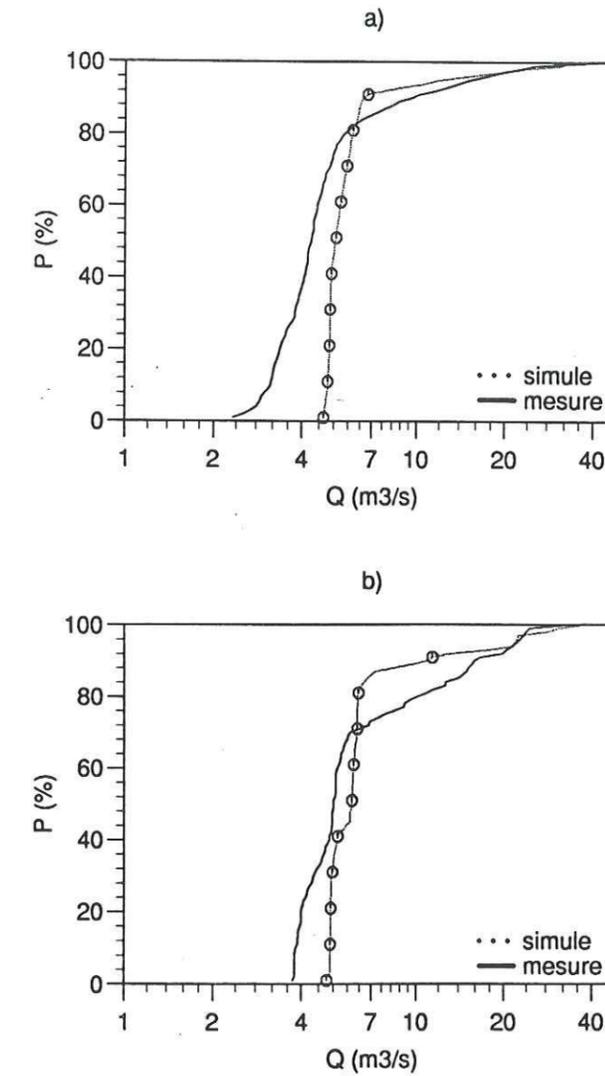


figure AIII.20: fonction de distribution des débits mesuré et simulé à Pommeuse (simulation de reprise)

a: janvier-décembre; b: mois de janvier et février uniquement

	Moyenne ($m^3 \cdot s^{-1}$)	Ecart-type ($m^3 \cdot s^{-1}$)	Coefficient de variation	Coefficient d'efficacité
Mesuré janvier-décembre	5,6	4,5	-	-
Simulé janvier-décembre	6,4	4,6	0,88	-0,22
Mesuré janvier-février	7,8	5,9	-	-
Simulé janvier-février	7,5	5,7	0,71	0,13

Tableau AIII.5: Propriétés statistiques des débits mesurés et simulés à Pommeuse (simulation de reprise)

ANNEXE III
PROBLEMES NUMERIQUES LIES AU CALCUL INVERSE DU
TRANSPORT DE PRODUITS PHYTOSANITAIRES DANS LA ZONE
SATUREE

AIII-1. OBJET DE L'ANNEXE

L'objet de cette annexe est de démontrer l'argumentation du chapitre III de ce mémoire (Cf. § III-3.2.), à savoir que l'utilisation d'un logiciel aux différences finies pour effectuer les calculs inverses du transport génère des instabilités numériques, qui conduisent à la non-convergence du calcul sur de longues périodes de simulation. De plus, ces instabilités rendent inexploitable les résultats de calcul, même si celui-ci n'a pas divergé. Les raisons de l'apparition de ces instabilités peuvent être expliquées rapidement par les considérations suivantes.

Nous rappelons l'équation à résoudre dans la zone saturée (convection pure et réaction):

$$\frac{dC}{dt} = -\lambda C \quad (AIII.1)$$

le long des lignes de courant passant par des points où la concentration est fixée, égale à C_0 . C (g.l^{-1}) est la concentration en soluté, λ (s^{-1}) son taux de dégradation et t (s) le temps. Dans le cadre de l'approche inverse du calcul de transport en régime hydraulique permanent, nous avons vu (Cf. § III-3.2.) que cette équation devient:

$$h \frac{\partial C}{\partial t} + \text{Div}(\mathbf{V}_i h C) = \lambda h C \quad (AIII.2)$$

h étant l'épaisseur de l'aquifère, \mathbf{V}_i (m^{-1}) le vecteur vitesse interstitielle, Div l'opérateur divergence.

Lors de tout calcul numérique, il apparaît des erreurs de troncature (liées aux schémas numériques employés) et d'arrondi (liées au calculateur). Lors de l'étape de convection, ces erreurs sont transportées sans modification. En revanche, lors de l'étape de réaction, elles sont amplifiées. Bien qu'en réalité les schémas de résolution de la convection aient tendance à amortir les instabilités, leur amplification lors de l'étape de réaction va prendre le pas sur l'amortissement: c'est cette amplification qui génère l'instabilité. Nous allons démontrer ceci de manière plus formelle dans le paragraphe AIII-2.

AIII-2. PROBLEMES LIES AUX LOGICIELS AUX DIFFERENCES FINIES

AIII.2.1. Notions de base en analyse numérique

Il existe trois propriétés principales que l'on désire voir satisfaites par un schéma numérique: la consistance, la convergence, et la stabilité. Des exposés détaillés de ces notions pourront être trouvées dans (Demailly, 1991, pp. 212-213).

Consistance

Soit un opérateur différentiel \mathcal{D} , approché aux différences finies par un opérateur discrétisé $\hat{\mathcal{D}}$ sur un maillage de pas d'espace Δx_i ($i=1, \dots, N$) (remarque: ce maillage peut concerner l'espace ou bien le temps). On définit une norme ($\|\cdot\|$), définie par:

$$\|\mathcal{S}\| = \sum_{i=1}^N |\mathcal{S}_i| \quad (\text{AIII.3})$$

L'opérateur discrétisé $\hat{\mathcal{D}}$ est dit consistant à l'opérateur différentiel \mathcal{D} si la norme $\|\mathcal{D} - \hat{\mathcal{D}}\|$ tend vers 0 quand le maximum des pas d'espace Δx_i tend vers 0.

D'un point de vue plus imagé, on dira qu'un opérateur discrétisé est consistant avec un opérateur réel si son comportement se rapproche du comportement de l'opérateur réel quand les pas d'espace et de temps tendent vers 0.

Convergence

Soit \mathcal{S} la solution exacte du problème différentiel

$$\mathcal{D}\mathcal{S} = 0 \quad (\text{AIII.4.a})$$

et $\hat{\mathcal{S}}$ la solution numérique du problème différentiel discrétisé:

$$\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{S}} = 0 \quad (\text{A.4.b})$$

La propriété de convergence est assurée si la norme $\|\mathcal{S} - \hat{\mathcal{S}}\|$ tend vers 0 quand le maximum des pas d'espace Δx_i tend vers 0.

D'une manière imagée, on dira qu'une solution discrétisée converge quand son comportement se rapproche de celui de la solution exacte lorsque les pas d'espace et de temps tendent vers 0.

Stabilité

Une méthode de résolution est dite stable s'il existe une constante κ positive (constante de stabilité), telle que, à tous les pas de temps de calcul n , on ait:

$$\|\hat{\mathcal{S}} - \mathcal{S}\|_n \leq \kappa (\|\hat{\mathcal{S}} - \mathcal{S}\|_0 + \|\varepsilon\|^n) \quad (\text{AIII.5})$$

Les indices 0 et n désignant les valeurs calculées aux pas de temps initial et n respectivement. ε est une erreur de calcul récurrente intervenant à chaque pas de temps de calcul.

Cette condition signifie que l'erreur liée à la discrétisation peut être "contrôlée" et ne dépasse pas une certaine proportion de l'erreur de discrétisation initiale, lorsque le pas de temps tend vers 0.

On trouve dans (Cunge, 1966, p. 14) une définition de la stabilité incluant l'influence des conditions aux limites:

le système d'équations différentielles $\mathcal{D}\mathcal{S} = f$, avec les conditions aux limites $\mathcal{D}\mathcal{S} = \phi$, est stable, si la solution \mathcal{S} satisfait à l'inégalité:

$$\|\hat{\mathcal{S}}\| < N_1 \|\hat{f}\| + N_2 \|\hat{\phi}\| \quad (\text{AIII.6})$$

N_1 et N_2 étant indépendants des pas d'espace et de temps $\Delta x, \Delta y$.

Théorème d'équivalence de Lax

Le théorème d'équivalence de Lax relie les propriétés de consistance, de stabilité et de convergence. Il peut être formulé de la manière suivante:

Soit un problème différentiel défini par $\mathcal{D}\mathcal{S} = 0$ et un schéma aux différences finies qui soit consistant avec l'opérateur \mathcal{D} . Alors, la stabilité est une condition nécessaire et suffisante pour la convergence.

AIII-2.2. Relations de base

L'objet de ce paragraphe est d'exposer des propriétés de base des schémas numériques aux différences finies. Ces relations seront utilisées dans le paragraphe AIII-2.3.

Proposition 1: la somme des coefficients d'un opérateur différentiel à coefficients constants discrétisé au niveau d'un point du maillage, consistant aux différences finies, est nulle.

Démonstration:

Soit \mathcal{D} un opérateur à discrétiser en un point i donné du maillage de calcul. Cet opérateur peut être décomposé sous la forme:

$$\mathcal{D}\mathcal{C} = \sum_{l=1}^{l_2} d_l \frac{\partial^l \mathcal{C}}{\partial x^l} \quad (\text{AIII.7})$$

Pour démontrer la proposition 1, il suffit de démontrer sa validité pour un opérateur différentiel simple ($l_1 = l_2 = 1$): par sommation, l'opérateur complexe \mathcal{D} aura toujours une somme de coefficients nulle.

On désigne par a_k les coefficients de l'opérateur discrétisé en un point j du maillage:

$$\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{C}}_j = \sum_{k=k_1}^{k_2} a_k \mathcal{C}_{j+k} \quad (\text{AIII.8})$$

k_1 et k_2 étant des entiers relatifs.

Exprimons C_{j+k} en fonction de C_j à l'aide d'un développement en série de Taylor:

$$C_{j+k} = C_j + \sum_{m=1}^M \frac{(x_{j+k} - x_j)^m}{m!} \frac{\partial^m C}{\partial x^m} \quad (\text{AIII.9})$$

où les valeurs x_i sont les abscisses des points du maillage.

Si l'on suppose vérifiée la propriété de consistance, en appliquant (AIII.9) à (AIII.8), on obtient:

$$\frac{\partial C}{\partial x^l} \equiv \sum_{k=k_1}^{k_2} a_k C_j + \sum_{k=k_1}^{k_2} \sum_{m=1}^M a_k \frac{(x_{j+k} - x_j)^m}{m!} \frac{\partial^m C}{\partial x^m} \quad (\text{AIII.10})$$

En égalant les membres gauche et droit de (AIII.10) pour chaque degré de dérivation, on a:

$$\sum_{k=k_1}^{k_2} a_k = 0 \quad (\text{AIII.11.a})$$

$$\sum_{k=k_1}^{k_2} a_k \frac{(x_{j+k} - x_j)^l}{l!} = 1 \quad (\text{AIII.11.b})$$

$$\sum_{k=k_1}^{k_2} a_k \frac{(x_{j+k} - x_j)^m}{m!} = 0 \text{ pour } m \neq l \quad (\text{AIII.11.c})$$

La formule (AIII.11.a) correspond bien à la proposition 1.

Proposition 2: la somme des coefficients d'un opérateur différentiel à coefficients constants discrétisé entre les points du maillage, consistant aux différences finies, est nulle.

Démonstration:

Si l'opérateur est discrétisé entre deux points du maillage, il peut être ramené à une somme d'opérateurs discrétisés au niveau des points du maillage. En effet, pour un opérateur différentiel simple, on a:

$$\left[\frac{\partial C}{\partial x^l} \right]_x = \left[\frac{\partial C}{\partial x^l} \right]_j + \sum_{m=1}^M \frac{(x - x_j)^{m-l}}{(m-l)!} \left[\frac{\partial^m C}{\partial x^m} \right]_j + o(x - x_j)^{M-l+1} \quad (\text{AIII.12})$$

et chacun de ces opérateurs, discrétisé de manière consistante au niveau des points de calcul, produit des coefficients dont la somme est nulle. La somme totale des coefficients est donc nulle, quel que soit l'endroit du maillage où l'opérateur est discrétisé: la relation (AIII.11.a) est donc toujours vérifiée, quelle que soit la manière dont un opérateur différentiel à coefficients constants a été discrétisé.

On remarquera que la condition (AIII.11.a) est une condition nécessaire pour la consistance du schéma, mais qu'elle n'est pas suffisante. En effet, un schéma dont la somme des

coefficients est nulle est consistant avec un opérateur différentiel, mais rien ne prouve que ce soit bien l'opérateur différentiel que l'on désire discrétiser. Elle permet toutefois de faire une première élimination des erreurs de calcul lorsque l'on construit un schéma numérique. On remarquera par exemple qu'un opérateur discrétisé sur deux points (en temps ou en espace) a ses deux coefficients opposés. Nous nous servirons de ce résultat par la suite.

AIII-2.3. Instabilités générées lors de la résolution classique de l'équation inverse du transport

Nous allons examiner ici le cas du transport unidimensionnel, à pas d'espace et vitesse constante. Le mode de résolution habituellement employé pour la résolution d'équations faisant intervenir deux processus physiques distincts est la méthode dite des pas fractionnaires:

- dans une première étape, on résout l'équation de convection pure sur un pas de temps:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (\text{AIII.13.a})$$

u étant la vitesse de convection, résultant de l'inversion du champ des vitesses réel.

- dans un deuxième temps, on résout l'équation de dégradation inverse:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \lambda C \quad (\text{AIII.13.b})$$

Nous ne traiterons ici que des schémas à deux niveaux en temps (dans le cadre de la résolution des équations différentielles classiques, de tels schémas sont appelés "schémas à un pas"), qui sont les schémas les plus utilisés.

AIII-2.3.1. Etape de convection

Dans la première étape, les amplitudes des perturbations numériques sont théoriquement conservées d'un pas de temps de calcul à l'autre. En réalité, les erreurs de troncature du schéma numérique introduisent généralement un amortissement de ces perturbations. Cependant, pour les perturbations de grande largeur (i.e. décrites par un grand nombre de mailles de calcul), l'amortissement est pratiquement nul: plus la perturbation est large, moins elle est amortie. Pour des largeurs de perturbation tendant vers l'infini, l'amortissement tend vers 0 et l'amplitude de ces perturbations est conservée. C'est ce que nous démontrons ci-dessous, par une méthode d'analyse spectrale.

Nous allons nous intéresser à l'amortissement des perturbations par un schéma implicite pur à deux niveaux en temps: en effet, les schémas implicites sont ceux qui présentent

l'amortissement le plus important; ils représentent donc la configuration la plus favorable pour la dissipation des perturbations. Pour un tel schéma, on aura:

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} = \frac{u}{\Delta x} \sum_{k=k_1}^{k_2} a_k C_{j+k}^{n+1} \quad (\text{AIII.14.a})$$

$$\sum_{k=k_1}^{k_2} a_k = 1 \quad (\text{AIII.14.b})$$

(AIII.14.b) étant donné par la proposition 2 du paragraphe précédent; soit encore:

$$C_j^{n+1} = C_j^n + \alpha \sum_{k=k_1}^{k_2} a_{j+k} C_{j+k}^{n+1} \quad (\text{AIII.15})$$

où α est le nombre de Courant.

Les solutions de (AIII.15) sont recherchées sous la forme (Smith, 1978; O'Brien et al., 1951):

$$C_j^n = C_0 \exp(i(\mu n \Delta t + \sigma j \Delta x)) \quad (\text{AIII.16})$$

μ étant complexe et σ un réel, i étant l'imaginaire pur tel que $i^2 = -1$.

L'introduction de (AIII.16) dans (AIII.15) et la simplification donne:

$$A \exp(i\mu_r \Delta t) = 1 + \alpha \sum_{k=k_1}^{k_2} a_k A \exp(i\mu_r \Delta t) \exp(i\sigma k \Delta x) \quad (\text{AIII.17})$$

où $\mu = \mu_r + i\mu_i$ et $A = \exp(-\mu_i \Delta t)$. A est appelé le facteur d'amplification numérique de la solution: si $|A| = 1$, l'amplitude des perturbations est conservée tout au long de la simulation; si $|A| < 1$, les perturbations sont amorties; si $|A| > 1$, elles sont amplifiées d'un pas de temps sur l'autre et le calcul est instable.

En utilisant la relation:

$$\exp(iX) = \cos X + i \sin X \quad (\text{AIII.18})$$

et en égalant les parties réelle et imaginaire de (AIII.17), on obtient:

$$A = \frac{\cos(\mu_r \Delta t)}{1 - \alpha \sum_{k=k_1}^{k_2} a_k (\cos(\sigma k \Delta x) + i \sin(\sigma k \Delta x))} \quad (\text{AIII.19.a})$$

$$\left(1 - \alpha \sum_{k=k_1}^{k_2} a_k (\cos(\sigma k \Delta x) + i \sin(\sigma k \Delta x))\right) \sin(\mu_r \Delta t) = \sum_{k=k_1}^{k_2} a_k i \sin(\sigma k \Delta x) \cos(\mu_r \Delta t) \quad (\text{AIII.19.b})$$

On introduit le nombre d'onde M , qui représente le nombre de points de calcul qui servent à discrétiser en espace la perturbation:

$$M = \frac{2\pi}{\sigma \Delta x} \quad (\text{AIII.20})$$

Nous allons étudier le comportement des ondes longues ($M \rightarrow +\infty$) et montrer que leur coefficient d'amplification tend vers 1 quand le nombre d'onde augmente.

Un développement limité à l'ordre 1 dans (AIII.19.a) par rapport à $1/M$ des fonctions trigonométriques donne:

$$A = \cos(\mu_r \Delta t) \left(1 + \alpha \sum_{k=k_1}^{k_2} a_k + \alpha \sum_{k=k_1}^{k_2} a_k \frac{2 i k \pi}{M}\right) \quad (\text{AIII.21})$$

En rappelant, d'après la proposition 2 du paragraphe précédent, que la somme des coefficients du schéma numérique est égale à 1 (Cf. AIII.14.b.), en introduisant cette condition dans (AIII.21):

$$A = \cos(\mu_r \Delta t) \left(1 + \alpha \sum_{k=k_1}^{k_2} a_k \frac{2 i k \pi}{M}\right) \quad (\text{AIII.22})$$

$$\text{Si } M \rightarrow +\infty, A \equiv \cos(\mu_r \Delta t) \quad (\text{AIII.23})$$

et, d'après (AIII.19.b), $\sin(\mu_r \Delta t) \rightarrow 0$. Donc $\cos(\mu_r \Delta t) \rightarrow 1$. Par conséquent, $|A|$ tend vers 1 lorsque le nombre d'onde tend vers l'infini. Notons que le graphique qui présente l'évolution de $|A|$ en fonction du nombre d'onde est appelé le *portrait d'amplitude* du schéma numérique. On trouvera dans (Cunge et al., 1982, pp 80-92), des exemples de portraits de phase et d'amplitude de divers schémas numériques.

AIII-2.3.2. Etape de dégradation inverse

Nous n'examinerons ici que les méthodes de résolution à deux niveaux en temps (dites encore "méthodes à un pas"). La résolution de (AIII.13.b) peut se faire de différentes manières: par le biais d'une solution analytique, ou par des algorithmes de type Runge-Kutta (dont la méthode d'Euler est un cas particulier).

Solution analytique

Toutefois, la meilleure résolution possible est celle qui consiste à appliquer, en tout point du domaine de calcul, la solution analytique de (AIII.13.b), à savoir:

$$C_j^{n+1} = C_j^n \exp(\lambda \Delta t) \quad (\text{AIII.24})$$

Le coefficient d'amplification B lié à l'étape de résolution de la dégradation inverse est donc:

$$B = \exp(\lambda \Delta t) \quad (\text{AIII.25})$$

Méthodes de type Runge-Kutta

Si l'on décide d'employer un algorithme de type Runge-Kutta d'ordre M quelconque, le pas de temps est subdivisé en $m-1$ intervalles au niveau desquels on estime la dérivée temporelle $C' = dC/dt$; alors, on a (Demailly, 1991):

$$C_j^{n+1} = C_j^n + \Delta t \sum_{m=1}^M b_m C_{j,m}' \quad (\text{AIII.26})$$

$C_{j,m}'$ étant la valeur de la pente dC/dt déterminée en j au m -ième point de l'intervalle Δt à partir de l'équation analytique (AIII.13.b) (Cf. Demailly, 1991, pp. 222-225).

Dans le cas qui nous occupe, les valeurs $C_{j,m}'$ sont toujours du signe de C_j^n et elles lui sont proportionnelles. (AIII.26) mène donc à une relation du type:

$$C_j^{n+1} = B_M C_j^n, B_M > 1 \quad (\text{AIII.27})$$

On notera que le facteur d'amplification des perturbations ne dépend pas de leur longueur d'onde, puisqu'aucune dérivée spatiale n'intervient dans l'expression des coefficients de la dégradation inverse.

AIII-2.3.3. Amplification sur un pas de temps

Le facteur d'amplification C sur un pas de temps est le produit des facteurs d'amplification associés à chacune des étapes:

$$C = A.B \quad (\text{AIII.28})$$

Pour les grands nombres d'onde, A est égal à 1 et B est supérieur à 1. Alors, C est supérieur ou égal à 1, ce qui signifie que la méthode conduit à une instabilité numérique pour les perturbations de grande longueur.

Rappelons que ces résultats ont été obtenus pour un schéma numérique faisant intervenir un nombre quelconque de points du maillage, donc qu'ils sont valables quel que soit l'ordre en espace du schéma utilisé pour la résolution de l'étape de convection.

En outre, nous avons établi la démonstration pour des schémas implicites purs, qui, à ordre de discrétisation égal en espace, présentent un facteur d'amplification moindre que les schémas explicites ou semi-implicites (pour lesquels l'instabilité serait encore plus forte): il est donc déconseillé d'effectuer les calculs inverses de transport en utilisant des logiciels aux différences finies classiques (approche Eulérienne). C'est pourquoi nous avons eu recours à un logiciel aux caractéristiques, qui résout directement l'équation (AIII.1) (approche Lagrangienne). Le paragraphe AIII-3. décrit sommairement le logiciel ARGOS, que nous avons utilisé afin de pallier les inconvénients décrits ici.

AIII-3. CALCULS DE TRANSPORT PAR LA METHODE DES CARACTERISTIQUES: LE LOGICIEL ARGOS

AIII-3.1. Présentation du logiciel

Le logiciel ARGOS (Usseglio-Polatera et Cunge, 1985; Usseglio-Polatera, 1988; Usseglio-Polatera and Libaux, 1990) a été conçu à l'origine pour simuler, dans un contexte bidimensionnel, le transport de polluant par les eaux de surface. Cependant, les équations qu'il traite sont identiques formellement à celles du transport en milieu souterrain. Il s'agit d'un logiciel de simulation découplée du transport de soluté (*i.e.* il résout l'équation du transport indépendamment du champ des vitesses, qui doit être déterminé par un autre logiciel de simulation des écoulements): il satisfait donc nos besoins, dans les conditions numériques particulières où nous l'utilisons (Cf. chapitre II, § II-3.2.).

AIII-3.2. Méthodologie d'utilisation

Ce logiciel peut être utilisé suivant deux approches différentes:

- une approche Eulérienne-Lagrangienne: les concentrations en chaque point du maillage sont calculées, à un pas de temps donné, en utilisant la méthode des caractéristiques inverses, et en effectuant une interpolation de type différences finies sur les points du maillage au pas de temps précédent. Nous avons vu cependant que l'usage de telles interpolations, dans le cas qui nous occupe, générerait des instabilités;
- une approche Lagrangienne pure, spécialement conçue pour simuler le transport des taches de polluant dont la taille est inférieure ou de l'ordre de celle de la maille de calcul: pour un pas de temps de calcul donné, on s'occupe uniquement de déterminer la position du centre et les dimensions de la tache de polluant, en fonction de sa position et de ses dimensions au pas de temps précédent. C'est cette approche que nous avons utilisée, car elle s'affranchit de l'interpolation aux différences finies des concentrations sur le maillage.

AIII-3.3. Problèmes généraux liés à l'utilisation de la méthode des caractéristiques

On rencontre en général deux types de problème lorsque l'on utilise la méthode des caractéristiques pour résoudre une équation de convection:

- la conservation de la masse n'est garantie que si le nombre de Courant $u\Delta t/\Delta x$ est uniforme sur le domaine de calcul (Li et Yu, 1994). Bien que ce problème ne nous concerne pas dans la présente application, il peut expliquer le désintérêt que l'on porte parfois à la méthode des caractéristiques;
- ces méthodes rencontrent des problèmes au voisinage des singularités: en effet, au voisinage d'un puits de pompage, par exemple, il n'est pas toujours possible de déterminer le pied de la caractéristique (l'écoulement est convergent et il existe plusieurs positions possibles pour le pied de la caractéristique). Ce problème est résolu dans une certaine mesure par les méthodes de suivi de particules (Cf. modèle MOC, Konikow and Bredehoeft, 1978). Cependant, ces méthodes sont plus lourdes à gérer car elles demandent la prise en compte d'un grand nombre de particules sur une maille de calcul pour déterminer des valeurs numériquement fiables de concentration.