



HAL
open science

Développement d'une modélisation du devenir de pesticides à l'échelle d'un versant au sein d'une plateforme hydrologique, prise en compte de la macroporosité

Karima Djabelkhir

► **To cite this version:**

Karima Djabelkhir. Développement d'une modélisation du devenir de pesticides à l'échelle d'un versant au sein d'une plateforme hydrologique, prise en compte de la macroporosité. Ingénierie de l'environnement. Université Grenoble Alpes, 2015. Français. NNT: 2015GREAU012. tel-02602333v2

HAL Id: tel-02602333

<https://theses.hal.science/tel-02602333v2>

Submitted on 30 Nov 2015

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.

UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Thèse en vue de l'obtention du diplôme de
Docteur de l'Université de Grenoble
par Karima Djabelkhir
Spécialité : Sciences de la Terre et Univers, Environnement
Arrêté ministériel : 7 août 2006

Thèse dirigée par **Nadia Carluer**
et codirigée par **Claire Lauvernet**

préparée au sein d'**Irstea Lyon-Villeurbanne**
dans l'Ecole Doctorale **Terre, Univers, Environnement**

Développement d'une modélisation du devenir de pesticides à l'échelle d'un versant au sein d'une plateforme hydrologique, prise en compte de la macroporosité.

Soutenance publique le 21 Juillet 2015 devant le jury
composé de :

Mr Jean Braun

Professeur à Université de Grenoble, président

Mr Roger Moussa

Directeur de Recherche, INRA Montpellier, rapporteur

Mr Laurent Lassabatere

IDTP, ENTPE, rapporteur

Mme Isabelle Braud

Directrice de recherche, Irstea Lyon-Villeurbanne, examinatrice

Mme Ophelie Fovet

Chargée de recherche, INRA Rennes, examinatrice

Mme Nadia Carluer

ICPEF HDR, Irstea Lyon-Villeurbanne, directrice de thèse

Mme Claire Lauvernet

Chargée de recherche, Irstea Lyon-Villeurbanne, co- directrice de thèse
(invitée)



A mes parents,

*« Ne tombez jamais amoureux de votre hypothèse
Au contraire, cherchez à la réfuter et non à la conforter »*

Claude Bernard

Remerciements

Ce manuscrit présente mes travaux de thèse effectués dans l'équipe Pollutions Agricoles Diffuses au centre Irstea de Lyon-Villeurbanne. Je souhaite d'abord adresser mes sincères remerciements à l'ensemble des personnes qui m'ont permis à travers leur aide et leur soutien de mener à bien ce travail de thèse.

Mes remerciements s'adressent dans un premier lieu à mes deux directrices de thèse Nadia Carluer et Claire Lauvernet pour la confiance qu'elles m'ont accordée pour mener ce travail de thèse. Je tiens également à leurs présenter ma gratitude pour leurs disponibilité, conseils et échanges scientifiques avec une certaine liberté dans le travail, ce qui m'a permis d'acquérir une certaine autonomie ainsi que beaucoup de compétences dans plusieurs disciplines. Merci Nadia pour tes remarques constructives et Claire pour ton enthousiasme. Nos réunions et discussions toujours enrichissantes m'ont permis d'apprendre beaucoup sur les modèles hydrologiques et les transferts dans les milieux poreux. J'en suis infiniment reconnaissante pour votre soutien pendant les moments difficiles, et de m'avoir toujours donné l'espoir que ce travail sera abouti.

Je tiens à remercier également Philipp Kraft, chercheur à l'université de Giessen, pour la volonté de collaboration qu'il a manifestée depuis le premier contact, afin d'avoir des utilisateurs de la plateforme CMF en France. Je le remercie pour le temps qu'il a consacré pendant mon séjour à l'université de Giessen, ainsi qu'à travers les échanges à distance. Mes vifs remerciements pour son déplacement au centre Irstea à Lyon, pour discuter de nouveaux développements. Merci pour les échanges sur les scripts python et les astuces pour les plots avec Pylab, malgré la difficulté de transmettre des idées par mail.

Je tiens à remercier également Jean Braun, professeur à l'université de Grenoble, qui m'a fait l'honneur d'accepté de présider mon jury de thèse, ainsi que pour son suivi tout au long de ma thèse et pour le soutien qui m'a manifesté lors des entretiens annuels de l'école doctorale. Mes remerciements vont également à tous les membres de jury. D'abord aux rapporteurs de la thèse Roger Moussa et Laurent Lassabatère, qui ont accepté de lire et d'évaluer mon manuscrit. Leurs retours m'ont été très précieux, ainsi qu'à l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail. Je remercie également les examinatrices de mon travail Isabelle Braud et Ophelie Fovet pour leur intérêt pour mon travail et leurs remarques instructives. J'en suis vraiment reconnaissante.

Mes vifs remerciements vont aux membres de mon comité de thèse : Flora Branger, Roger Moussa et Sylvain Payraudeau pour leur disponibilité et leurs remarques et recommandations constructives qui ont permis de bien orienter ce travail de thèse. Un grand merci à eux.

Je souhaite remercier également toute l'équipe Poldiff pour son accueil chaleureux, son soutien et les moments qu'on a pu échanger pendant les réunions, les pauses café ou le déjeuner. Merci Jean-Joël Gril, Lucie Liger, Véronique Gouy, et Guy Le Henaff qui m'ont accompagné depuis le début de ma thèse et qui m'ont permis de me familiariser avec les thématiques de l'équipe, d'acquérir des compétences sur les processus de transfert des produits phytosanitaires, les expérimentations sur le terrain ainsi que l'efficacité

des zones tampons et surtout à Jean-Joël Gril pour ta relecture, tes schémas et à Lucie pour ton soutien, ton aide et les sorties de trains qui m'ont permis d'acquérir de l'expérience. Merci à mes co-bureaux : Laura pour ta bonne compagnie et ton soutien en fin de thèse, Romain pour tous les échanges qu'on a eus autour de Macro, RZWQM et Hydrus, Xavier pour ton écoute, tes encouragements, ta relecture et ton aide pour les plots R. Je vous souhaite bon courage dans votre fin de thèse. Merci à Clotaire, Béatrice, Julie, Guillaume et Cécile pour votre soutien sans oublier les anciens qui ont fait partie de l'équipe au fil de temps : Christine, Guilhem, Frédéric et Gauthier.

Je remercie tout le centre de Lyon et en particulier le directeur de centre Pascal Boistard d'avoir accepté ma présence dans le centre. Merci à Adeline, Edwige et Sandrine pour leur aide dans les démarches administratives. Un grand merci à Vanessa pour son aide dans l'organisation des réunions, les démarches des déplacements et enfin pour ma soutenance. Merci à Antoine, Jean-Pierre et Frédéric du service informatique, qui étaient toujours présents pour gérer les licences, les soucis et le matériel informatique. Merci à tous les collègues de l'équipe HH, avec qui on partage notre quotidien, les gâteaux, le café et nombreuses discussions.

J'exprime également mes vifs remerciements à mes copines en Algérie et un peu partout dans le monde. Merci Amel pour ton continu soutien et ta bonne humeur. Merci Amen, Fadoua, Taous, Khedidja, Lydia, Nesrine, Sarah, Erij, Soumia, Natalie, Ina, Claire et Latifa pour votre compagnie, votre écoute et votre soutien à tout moment et quelle que soit la distance. Merci à Khedidja Abbaci pour ton soutien. Ton avis m'est toujours précieux. Un grand merci à toi doudou pour ta présence et ton aide.

Enfin, j'exprime mes sincères remerciements à ma famille qui m'ont toujours épaulée depuis mon parcours en Algérie jusqu'à mon séjour en France. Mes remerciements vont en particulier à mes parents pour leur encouragement, leur patience et leur confiance en moi. Vous étiez mon modèle de labeur et de persévérance et sans vous, je n'aurai jamais pu réussir cette expérience à l'étranger. Un grand merci à mes frères et sœurs qui ont toujours été à mes côtés et m'ont appuyé dans cette expérience pleine de défis.

Je présente, à vous tous, mes remerciements, mon respect et ma gratitude.

Résumé

L'objectif général de la thèse est d'améliorer la représentation et la compréhension des processus liés au transfert des produits phytosanitaires à l'échelle d'un versant, en adoptant une approche simplifiée pour une modélisation spatialisée. Pour ce faire, nous avons choisi d'intégrer les processus que l'on suppose dominants à l'échelle d'un versant dans une plateforme hydrologique qui serait « orientée-processus », modulaire, évolutive, et open source. La plateforme de modélisation hydrologique CMF, développée à l'université de Giessen (Kraft, 2012) a été choisie pour mettre en œuvre cette approche. La caractérisation de la réponse hydrologique de la plateforme a été menée en deux étapes : des simulations en 1D ont d'abord été comparées à celles réalisées via Hydrus1D ; des simulations en 2D ont été menées en comparant les résultats obtenus avec ceux du modèle Cathy en se basant sur les travaux de Sulis et al. (2010) pour caractériser la représentation du ruissellement, et avec ceux d'Hydrus2D (Simunek et al., 1999 & Simunek et al., 2001), sur un versant inspiré du versant expérimental de la Morcille, bassin versant suivi par l'équipe Pollutions Diffuses, pour caractériser la représentation des écoulements subsurface.

La suite de ce travail de thèse a consisté à développer un modèle à double perméabilité au sein de CMF, afin de permettre la prise en compte des écoulements préférentiels dans certains types de sol structurés, nécessaire pour une meilleure représentation des processus en jeu. L'approche à double perméabilité (DP) choisie a induit le développement d'une nouvelle fonction d'infiltration en surface des macropores. Le modèle DP contient également deux fonctions alternatives pour représenter les échanges matrice-macropores : la première est proportionnelle à la différence de degré de saturation des deux compartiments du sol (Philip, 1968) ; la deuxième correspond à une onde diffusante analogue à l'approche présentée par van Genuchten (1993). La validation de l'approche DP a été réalisée via une comparaison avec la version double perméabilité d'Hydrus1D/2D, sur 4 sols types. Les résultats ont montré que les deux modèles conduisaient à une réponse proche en 1D pour les différents sols testés. Toutefois, des différences ont été observées en 2D. Elles peuvent notamment s'expliquer par les conceptualisations différentes adoptées par les deux modèles : CMF ne représente le transfert préférentiel que sur la verticale, alors qu'Hydrus2D représente l'ensemble des écoulements en 2D. Enfin, le transport de solutés au sein de CMF a été modélisé en simple porosité et en double perméabilité, en se limitant pour l'instant à la prise en compte de l'adsorption, et pas de la dégradation. Les premiers tests ont montré que la représentation des processus de dispersion demandait à être améliorée. Au total, cette thèse a permis de poser les bases d'une adaptation de la plateforme CMF à la représentation du devenir des pesticides au sein des bassins versants, en tenant compte des éléments du paysage.

Mots clés : Modélisation hydrologique, CMF, plateforme hydrologique, double perméabilité, simple porosité, processus, transport de solutés, pesticide.

Abstract

The general aim of the thesis is to improve representing and understanding of pesticide fate at the hillslope scale using a simplified spatial modeling approach. This has been done by integrating dominant processes at the hillslope scale in a hydrological framework, which would be "process-oriented", modular, scalable, and open source. Hydrological modeling framework CMF, developed at the Giessen University (Kraft, 2012) was chosen to implement this approach. The characterization of the hydrological response of this framework has been done in two steps: 1D simulations were first compared to those made via Hydrus1D ; 2D simulations were secondly compared with the results of Cathy model based on Sulis et al. (2010) benchmark to characterize the performance of the run-off, and with those of Hydrus2D (Simunek et al., 1999 & Simunek et al., 2001), on a hillslope similar to Morcille experimental hillslope, to characterize subsurface flow representation in CMF.

The next step of this work was to develop a dual permeability model in CMF in order to model preferential flow that may occur within structured soil, which requires representing this process. The dual permeability approach (DP) was chosen to perform development of a new infiltration function in macropores surface. The DP model contains also two alternative functions to represent the matrix \Rightarrow macropores transfert: the first one is proportional to the difference of saturation degree of two soil compartments (Philip, 1968); the second function corresponds to a diffusing wave similar to the approach presented by van Genuchten (1993). Validation of the developed DP approach was done via a comparison with the dual permeability approach of Hydrus1D/2D, for the 4 soil-types. The results were similar in both models for the 1D case for the different tested soils. However, differences were observed in 2D. They may be explained by the different conceptualizations adopted by two models: CMF represents the preferential transfer on the vertical, while Hydrus2D represent fluxes in 2D. Finally, the solute transport in CMF was modeled using single porosity and dual permeability approaches, limited for now to the consideration of adsorption, neglecting degradation. The first tests showed that the dispersion process representation required to be improved. Overall, this thesis laid the foundation for adapting the CMF framework representing the pesticide fate within the watersheds, taking into account the landscape elements.

Keywords: hydrological modeling, CMF, hydrological framework, dual permeability, single porosity, processes, solute transport, pesticide.

Table des matières

Table des matières	9
Liste des figures.....	13
Liste des tableaux	17
Introduction générale.....	19
1. Problématique et enjeux	20
2. Objectifs et démarche de la thèse.....	22
3. Plan du manuscrit.....	24
Chapitre I : Représentation des processus de transport hydrique advenant à l'échelle d'un versant	26
Chapitre I : Représentation des processus de transport hydrique advenant à l'échelle d'un versant	27
I.1. Contexte hydrologique	27
I.1.1. Processus hydrologiques en jeu	28
I.1.2. Typologie classique des modèles hydrologiques	32
I.1.3. Cahier des charges	34
I.1.4. Conclusion	36
I.2. Etat de l'art des plateformes hydrologiques	37
I.2.1. Etat de l'art.....	37
I.2.2. Quelques plateformes hydrologiques existantes	38
I.2.3. Synthèse et choix de la plateforme pour la thèse	45
I.3. La plateforme CMF (Catchment Modeling Framework)	46
I.3.1. Présentation générale et définitions	46
I.3.2. Fonctions de flux utilisées dans le cadre de cette thèse	53
I.3.3. En pratique : comment développer un modèle hydrologique avec CMF ?.....	57
Conclusion.....	61
Chapitre II : Scénarios tests de la plateforme hydrologique CMF	62

Introduction	63
II.2. Prise en main de CMF	65
II.2.1. Contexte.....	65
II.2.2. Méthodologie et résultats	65
II.2.4. Conclusion.....	68
II.3. Confrontation de CMF avec un benchmark de ruissellement.....	69
II.3.1. Contexte.....	69
II.3.2. Description du benchmark de Sulis et al. (2010).....	70
II.3.3. Elaboration et paramétrisation du benchmark	71
II.3.4. Analyse des résultats et corrections de la version de CMF disponible initialement.....	74
II.3.5. Nouvelle version de CMF-0.967	83
II.3.6. Conclusion.....	87
II.4. Comparaison des résultats obtenus avec CMF et Hydrus2D sur un versant inspiré du versant expérimental de la Morcille.....	88
II.4.1. Méthodologie.....	88
II.4.2. Présentation du cas d'étude de versant	89
II.4.3. Résultats et discussions	90
II.4.5. Nouvelle version CMF avec la moyenne harmonique	96
II.4.6. Conclusion de la comparaison de la nouvelle version de CMF avec Hydrus2D.....	98
Conclusion.....	99
Chapitre III : Développement d'un modèle à double perméabilité	101
Introduction	102
III.1.1. Démarche du chapitre	103
III.1.2. Définitions concernant le flux préférentiel.....	104
III.2. Bref état de l'art des recherches sur les écoulements préférentiels	106
III.3. Approches de la Modélisation des domaines à écoulements préférentiels : les différentes approches	108
III.3.1. Modèle à simple porosité (SPM).....	108
III.3.2. Modèle à double porosité	109
III.3.3. Modèle à double perméabilité	110

III.3.4. Conclusion.....	111
III.4. Comparaison de trois modèles à double perméabilité	111
III.4.1. MACRO	112
III.4.2. Root Zone Water Quality Model (RZWQM)	114
III.4.3. HYDRUS 2D	115
III.4.4. Synthèse	117
III.5. Développement du module à double perméabilité dans CMF.....	118
III.5.1. Comment construire le modèle DP dans CMF ?	119
III.5.2. Choix des fonctions à développer	120
III.5.3. Conclusion.....	127
III.6. Evaluation du module de double perméabilité sur différents scénarios	128
III.6.1. Modélisation 1D du scénario de Simunek et al. (2003)	128
III.6.2. Modélisation 1D sur les quatre sols-types.....	132
III.6.3. Modélisation 1D sur un sol sableux-limoneux avec une pluie en créneau.....	137
III.6.4. Modélisation à deux dimensions	141
Conclusion.....	145
Chapitre IV : Modélisation du transfert de solutés au sein de la plateforme de modélisation CMF.....	147
Introduction : Transferts hydriques des pesticides.....	148
IV.2. Représentation des processus régissant le devenir des pesticides dans l'environnement	150
IV.3. Démarche suivie pour la modélisation du transfert des solutés	154
IV.4. Modélisation de transport des solutés non-réactifs en simple porosité.....	157
IV.4.1. Méthodologie.....	157
IV.4.2. Résultats et discussions	158
IV.4.2. Conclusion.....	162
IV.5. Transport des substances réactives dans CMF	163
IV.5.1. Modélisation du transport en simple porosité.....	163
IV.5.2. Modélisation du transport en double perméabilité	166
Conclusion.....	169
Conclusion générale	171

V.1. Rappel de la démarche.....	172
V.2. Résultats et « non-résultats »	173
Conclusion sur l'outil de travail.....	176
V.3. Perspectives scientifiques	177
V.4. Perspectives opérationnelles.....	178
Bibliographie.....	179
Annexes	193
Annexe (1).....	194
Annexe (2).....	196
Annexe (3).....	198

Liste des figures

Figure 1 : Processus de génération du ruissellement (Musy, 1998).....	28
Figure 2 : Présentation modulaire d'un versant en pente (CORPEN, 2007).	36
Figure 3 : Composantes de la plateforme de modélisation LIQUID (gauche) et représentation schématique d'un module (droite) d'après Branger et al. (2009).	40
Figure 4 : Flux modélisés avec MHYDAS.....	41
Figure 5 : Fonctionnement de la plateforme de modélisation JAMS (Kralisch, 2012).	43
Figure 6 : Connexion des flux dans CMF (Kraft, 2012).....	44
Figure 7 : Abstraction hiérarchique des réservoirs et des flux (Kraft, 2012).	47
Figure 8 : Structure de CMF.....	48
Figure 9 : Schéma simplifié des classes UML de CMF (Kraft et al. 2011).	49
Figure 10 : Algorithme de résolution d'un flux de connexion dans CMF.	51
Figure 11 : Schéma du modèle dans CMF avec les fonctions existantes pour représenter le transfert hydrique à l'échelle d'un versant.....	57
Figure 12 : Profil de sol limoneux-sableux avec un flux constant 20,8 mm/h en surface et un drainage libre en bas de profil ($\Delta z = 1\text{cm}$) a) Percolation (mm/j) b) Degré de saturation (m^3/m^3) et c) Potentiel matriciel (m) en fonction de la profondeur.....	66
Figure 13 : Flux (mm/h) percolant en bas du profil du sol limoneux-sableux dans CMF et Hydrus1D.	67
Figure 14 : Flux (mm/h) infiltré en surface du profil du sol limoneux-sableux.	67
Figure 15 : Profils d'humidité du sol limoneux-sableux dans CMF et Hydrus1D ($\Delta z = 1\text{cm}$).	68
Figure 16 : Schéma du versant du benchmark avec le découpage adopté dans Cathy (Sulis et al., 2010).	71
Figure 17 : Schéma du modèle dans CMF avec les fonctions adoptée pour représenter le transfert hydrique.	73
Figure 18 : Hydrogramme de flux (mm/h) à l'exutoire du versant ayant un sol sableux-limoneux dans le cas du ruissellement par excès de saturation pour différentes profondeurs de nappe (gauche) et par excès d'infiltration pour différentes conductivités hydrauliques à saturation (droite).	75
Figure 19 : Potentiel total des différentes mailles avec CMF dans le cas de la nappe à 1m, $\Delta z = 0,0125\text{m}$ (gauche) et $\Delta z = 0,2\text{m}$ (droite), en fonction du temps.	76

Figure 20 : Profil du potentiel total de la maille (0) avec CMF dans le cas du ruissellement hortonien : $K_{sat} = 4,16$ mm/h (droite) et $K_{sat} = 0,41$ mm/h (gauche).....	77
Figure 21 : Profil du potentiel total avec CMF dans le cas du ruissellement par excès de saturation pour une nappe à 0,5m (gauche) et la nappe à 1m (droite).....	77
Figure 22 : Hydrogramme de flux à l'exutoire (mm/h) dans le cas du ruissellement par excès de saturation (gauche) et par excès d'infiltration (droite) avec CMF-0.852.....	78
Figure 23 : Erreur relative (en log10) en fonction de la discrétisation verticale. Haut : ruissellement par excès de saturation a) nappe à 0,5m b) nappe à 1m. Bas : ruissellement par excès d'infiltration c) $K_{sat} = 0,41$ mm/h d) $K_{sat} = 4,16$ mm/h.....	81
Figure 24 : Flux à l'exutoire (mm/h) dans le cas du ruissellement par excès de saturation ($K_{sat} = 41,64$ mm/h) dans le cas d'une pente à 0,05% (gauche) et 5% (droite).....	82
Figure 25 : Flux à l'exutoire (mm/h) dans le cas du ruissellement par excès d'infiltration ($K_{sat} = 4,16$ mm/h) dans le cas d'une pente à 0,05% (gauche) et 5% (droite).....	82
Figure 26 : Hydrogramme de flux à l'exutoire dans le cas du ruissellement par excès de saturation (gauche) et par excès d'infiltration (droite) avec CMF-0.967.....	84
Figure 27 : Teneur en eau dans CMF de la maille la plus en aval (Maille1) et la plus en amont (Maille5) à différents temps dans le cas du ruissellement saturation (nappe à 1m gauche) et par excès d'infiltration ($K_{sat} = 4,16$ mm/h droite).....	85
Figure 28 : Erreur relative (en log10) en fonction de la discrétisation verticale.....	86
Figure 29 : Flux à l'exutoire dans le cas du ruissellement par excès de saturation pour les deux pentes 0,05% (gauche) et 5% (droite).....	87
Figure 30 : Flux à l'exutoire dans le cas du ruissellement par excès d'infiltration à 0,05% (gauche) et 5% (droite) de pente.....	87
Figure 31 : Schéma des conditions aux limites et du maillage de versant dans Hydrus2D.....	91
Figure 32 : Infiltration sur la surface du versant dans CMF et Hydrus2D pour différentes résolutions en surface de CMF.....	92
Figure 33 : Flux de subsurface à l'exutoire du versant dans CMF et Hydrus2D pour différentes résolutions en surface de CMF.....	92
Figure 34 : Profils d'humidité d'un profil en bas du versant dans CMF et Hydrus2D.....	93
Figure 35 : Profils d'humidité d'un profil au milieu du versant dans CMF et Hydrus2D.....	93
Figure 36 : Profils d'humidité d'un profil en haut du versant dans CMF et Hydrus2D.....	93
Figure 37 : Hydrogramme de flux de subsurface à l'exutoire.....	95

Figure 38 : Teneur en eau un profil en amont du versant dans CMF (20 mailles) et Hydrus2D.	95
Figure 39 : Hydrogramme du flux de subsurface à l'exutoire du versant en sol homogène de la Morcille. ...	96
Figure 40 : Hydrogramme du flux de subsurface à l'exutoire du versant ayant un sol homogène	97
Figure 41 : Schéma des mouvements des solutés dans un sol structuré proche de la saturation.....	105
Figure 42 : Schéma simplifié d'un modèle à double porosité (gauche) et un modèle.....	109
Figure 43: Schéma simplifié d'un modèle à double perméabilité (BRGM, 2004).	110
Figure 44 : Illustration des écoulements dans les macropores (Germann and Beven, 1981).	111
Figure 45 : Courbe de rétention d'eau dans Macro (Larsbo and Jarvis, 2003).	112
Figure 46 : Héritage des classes SoilLayer et MacroPore dans CMF.	119
Figure 47 : Structure d'un modèle 2D à Double Perméabilité dans CMF.	120
Figure 48 : Schéma simplifié de l'infiltration dans CMF suivant le modèle à DP.	121
Figure 49 : Profil 1D avec les fonctions de CMF-DP existantes et développées dans le cas de la thèse.	125
Figure 50 : Infiltration (haut) et taux de saturation (bas) dans un profil 1D du sol dans les compartiments matrice et macropore suivant un modèle à DP dans CMF.	126
Figure 51 : Fonctions décrivant l'estimation du volume de réservoir de macropores dans	127
Figure 52 : Fonctions décrivant l'estimation du volume du réservoir de macropores	127
Figure 53 : Infiltration (cm/j) en surface de la matrice (gauche) et des macropores (droite).....	130
Figure 54 : Flux (cm/j) transféré des macropores vers la matrice dans CMF et Hydrus1D dans le cas d'un sol limoneux.	130
Figure 55 : Profil d'humidité dans la matrice dans CMF et Hydrus1D à différents pas de temps.	131
Figure 56 : Infiltration en surface dans la matrice (gauche) et dans les macropores (droite).....	134
Figure 57 : Infiltration en surface dans la matrice (gauche) et dans les macropores (droite).....	134
Figure 58 : Infiltration en surface dans la matrice (gauche) et dans les macropores (droite).....	135
Figure 59 : Infiltration en surface dans la matrice (gauche) et dans les macropores (droite).....	135
Figure 60 : Ttransfert des macropores vers la matrice (cm/j) dans le cas d'un sol a) SIL b) SAL c) CLO d) SCL dans CMF et comparaison avec Hydrus1D.	136
Figure 61 : Infiltration en surface de la matrice dans CMF et Hydrus1D.	139
Figure 62 : Infiltration en surface dans les macropores dans CMF et Hydrus1D.	139
Figure 63 : Transfert des macropores vers la matrice dans CMF et Hydrus1D.....	140

Figure 64 : Profils d'humidité de la matrice dans CMF-JarvisMME et Hydrus1D.	140
Figure 65 : Profils d'humidité de la matrice dans CMF-PhilipMME et Hydrus1D.	140
Figure 66 : Infiltration dans la matrice dans CMF et Hydrus2D en double perméabilité.	143
Figure 67 : Infiltration dans les macropores dans CMF et Hydrus2D en double perméabilité.	143
Figure 68 : Le transfert des macropores vers la matrice dans le versant dans CMF suivant les deux fonctions d'échange et dans Hydrus2D.	143
Figure 69 : Représentation es voies de transport des pesticides à partir des terres agricoles en pente avec une couche imperméable (Tang et al., 2012).	149
Figure 70 : Schéma de la conceptualisation du modèle de transport de solutés dans CMF.	156
Figure 71 : Structure d'un modèle 2D à Double Perméabilité dans CMF.	157
Figure 72 : Flux de traceur à différentes profondeurs dans CMF et Hydrus1D - $D_L = 1$ cm.	159
Figure 73 : Flux de traceur à différentes profondeurs dans CMF et Hydrus1D- $D_L = 10$ cm.	159
Figure 74 : Représentation du versant dans Hydrus2D avec les points d'observation.	160
Figure 75 : Concentration dans les points d'observation de surface dans CMF et Hydrus2D dans le cas $D_L = 1$ cm.	161
Figure 76 : Concentration dans les points d'observation de subsurface dans CMF et Hydrus2D.	161
Figure 77: Flux de soluté à différentes profondeurs dans CMF et Hydrus1D dans le cas de la variante (1).	164
Figure 78 : Flux de soluté à différentes profondeurs dans CMF et Hydrus1D dans le cas de la variante (2).	165
Figure 79 : Flux de soluté à différentes profondeurs dans CMF et Hydrus1D dans le cas de la variante (3).	165
Figure 80 : Flux de soluté en surface de la matrice dans CMF et dans Hydrus1D.	167
Figure 81 : Flux de soluté en bas de profil de la matrice dans CMF et Hydrus1D.	167

Liste des tableaux

Tableau 1 : Récapitulatif des simulations menées dans le chapitre 2.	64
Tableau 2 : Bilans d'eau des simulations CMF	68
Tableau 3 : Récapitulatif des simulations dans CMF.....	74
Tableau 4 : Résumé des débits des pics de simulations dans CMF et Cathy avec la résolution la plus fine... ..	79
Tableau 5 : Bilans d'eau des simulations CMF-0.852 sur les scénarios du benchmark.	80
Tableau 6 : Résumé des débits des pics de simulations dans CMF-0.967 et Cathy.....	84
Tableau 7 : Bilans d'eau des simulations CMF sur les scénarios du benchmark.	85
Tableau 8 : Caractéristiques hydrodynamiques des sols.....	90
Tableau 9 : Bilans d'eau des simulations CMF	94
Tableau 10 : Bilans d'eau des simulations CMF	95
Tableau 11 : Erreur sur les bilans d'eau dans CMF.	97
Tableau 12 : Récapitulatif des simulations menées dans le chapitre 3.	104
Tableau 13 : Equations adoptées pour le devenir de l'eau et des pesticides dans les différents modèles MACRO, RZWQM et Hydrus2D-DP.....	117
Tableau 14 : Caractéristiques hydrodynamiques de l'exemple publié dans Simunek et al. (2003).....	129
Tableau 15 : Erreurs des bilans d'eau des différents scénarios.....	131
Tableau 16 : Caractéristiques hydrodynamiques de la matrice dans CMF et Hydrus1D des sols-types.	133
Tableau 17 : Caractéristiques hydrodynamiques des macropores dans CMF et Hydrus1D des sols-types... ..	133
Tableau 18 : Erreurs des bilans d'eau des différents scénarios.....	136
Tableau 19 : Caractéristiques hydrodynamiques du sol dans CMF et Hydrus1D.	137
Tableau 20 : Bilans de masse dans CMF et Hydrus1D dans le cas du transport non-réactif et réactif.....	162
Tableau 21 : Variantes de coefficients de dispersion et de diffusion testées dans cas du transport réactif en simple porosité.....	163
Tableau 22 : Bilans de masse dans CMF et Hydrus1D dans le cas du transport réactif.	168

Introduction générale

Introduction générale

1. Problématique et enjeux

L'impact des pratiques agricoles modernes (agriculture intensive, disparition du bocage, intensification de l'utilisation de fertilisants et de pesticides...) est particulièrement important sur la qualité des eaux, qu'elles soient superficielles ou souterraines. En France, l'activité agricole fait appel à de considérables quantités d'intrants (engrais et produits phytosanitaires, également appelés pesticides), se classant au premier rang des consommateurs de pesticides au niveau européen et au quatrième à l'international.

Dans les années 1980, une première directive européenne pour l'alimentation en eau potable se basait sur les limites de quantification des substances actives de l'époque, en limitant les concentrations à 0,1 µg/l pour chaque substance phytosanitaire et 0,5 µg/l pour l'ensemble de ces substances (Lacas, 2005). Depuis, l'évolution des méthodes analytiques a permis de prouver que le respect de cette norme est insuffisant pour prévenir les impacts de ces nombreuses substances toxiques, qu'elles soient retrouvées dans les réseaux d'eau potable ou les rivières.

L'homologation des produits phytosanitaires avant leur mise sur le marché est soumise à la directive européenne 91/414/CEE, basée sur des scénarios dits de « pires cas réalistes », définis pour couvrir une grande partie des situations à risque pour le transfert des pesticides au niveau européen. Ces scénarios concernent les exportations par ruissellement, drainage ou percolation. La mise en œuvre de modèles de transfert hydriques des pesticides à l'échelle de la parcelle (FOCUS, 2001, 2002; Boesten, 2004) pour ces pires cas réalistes permet d'identifier les substances présentant un potentiel de transfert significatif dans l'environnement, et de ne pas autoriser leur utilisation dans des produits commerciaux. Les modèles utilisés dans ce cadre permettent de simuler le devenir d'une substance active à l'échelle de la parcelle pour un climat, un type de sol et un couvert végétal donnés, en tenant compte des propriétés de la substance à étudier. Cependant, on trouve de nombreuses limites à la fois aux modèles et aux scénarios utilisés :

- les modèles sont unidimensionnels, et ne prennent notamment pas en compte les effets de bord (conditions limites amont) liés à la position de la parcelle dans un bassin versant ou sur des petits versants. Ainsi, les simulations issues de ces modèles ne représentent pas les éventuelles interactions avec les écoulements subsurface. De plus, ils ne simulent pas tous les processus entrant en jeu dans le transport de l'eau et des pesticides : MACRO, Macropore Flow Model (Jarvis, 1994a) et PEARL, Pesticide Leaching at Regional and Local scales, (Tiktak *et al.*, 2012) ne simulent pas le ruissellement mais représentent de façon physique l'hydrologie dans le sol (drainage et percolation).

PRZM, Pesticide Root Zone Model (Suárez, 2005) et PELMO, Pesticide Leaching Model (Klein *et al.*, 1997; Ferrari *et al.*, 2005), quant à eux, représentent de façon plus conceptuelle l'hydrologie dans le sol, mais simulent le ruissellement. Enfin, MACRO est le seul modèle à prendre en compte des écoulements préférentiels, qui jouent un rôle essentiel dans le transport des pesticides.

- les « pires cas réalistes » utilisés dans le cadre de l'homologation ne peuvent pas, de par leur nombre très limité, être représentatifs de l'ensemble des situations que l'on peut trouver en Europe. En particulier, la forte hétérogénéité spatiale et temporelle (phénomène de battance notamment) des caractéristiques hydrodynamiques des sols, qui peuvent influencer de manière très importante la capacité d'infiltration du sol, ou les conditions climatiques locales et leur dynamique peuvent se conjuguer d'une manière non prise en compte par ces scénarios.

Ainsi, il nous semble que la prise en compte des conditions aux limites des parcelles, et de l'influence de bandes enherbées ou autres solutions correctives sur le versant, permettrait *a priori* de couvrir beaucoup plus de situations possibles sur le terrain que les scénarios d'homologation actuels ne le font.

Enfin, en parallèle à l'homologation, la Directive Cadre sur l'Eau (2000/60/CE) exige que toutes les eaux communautaires aient atteint un « bon état écologique et chimique » à l'horizon 2015, imposant une obligation de résultats qualitatifs et quantitatifs (Carluet, 2013). La maîtrise et la réduction de la contamination sont donc des enjeux majeurs pour la protection des ressources en eau de surface et souterraines, ainsi que pour l'équilibre de la faune et de la flore aquatiques. Afin de respecter ces obligations de résultats, on a besoin de méthodes et outils pour aider à la gestion des produits homologués et épandus sur les parcelles. Cette gestion peut passer par la proposition de solutions correctives, en actant que l'utilisation de produits implique forcément un risque de transfert, et qu'il convient donc de protéger les cours d'eau en limitant leur impact/transfert.

Ainsi, qu'il s'agisse de contribuer à la réflexion pour améliorer les méthodes d'homologation ou de proposer des solutions correctives, il est clairement nécessaire d'avoir une meilleure connaissance des liens entre pression d'usage des pesticides, exposition dans le milieu aquatique et impact sur les écosystèmes aquatiques. La très grande diversité des milieux déjà évoquée se mêle à la grande complexité des processus en jeu dans le transfert des pesticides : transferts associés à la circulation de l'eau, adsorption sur le sol, transformations physico-chimique ou biologique, etc. (Calvet, 2005). Comprendre et quantifier ces processus, et prévoir les risques de contamination des eaux associés implique non seulement l'identification des voies de dissémination des produits phytosanitaires mais aussi une description représentative des processus régissant ces transferts. Pour cela, des données expérimentales sont nécessaires pour affiner les connaissances locales des processus en jeu, et aider à la compréhension des voies de transfert des pesticides au sein des éléments étudiés. Cependant, ces expérimentations qui étudient le transfert de pesticides sur un versant (Louchart *et al.*, 2000; Peyrard *et al.*, 2014; Samouelian *et al.*, 2014), ou au sein d'une bande enherbée (Lacas *et al.*, 2005), lors d'évènements naturels ou artificiels, nécessitent une mise en place très lourde, difficilement reproductible, et donnent des informations locales. Le passage à l'échelle du versant, puis à d'autres versants, avec d'autres types de sol, climats, pratiques culturales, ne peut se faire que par le

recours à la modélisation. En particulier, si l'on souhaite étudier l'influence des éléments du paysage, et de leur emplacement sur le versant, sur le transfert, et passer à l'échelle du bassin versant, alors la modélisation spatialisée est un outil puissant permettant de comprendre et quantifier ces processus à différents niveaux de complexité (Branger *et al.*, 2008). Outre l'amélioration de la connaissance des processus par l'expérimentation, les données terrain acquises localement permettent alors également de renseigner une partie des paramètres nécessaires aux modèles pour extrapoler à des échelles plus grandes.

2. Objectifs et démarche de la thèse

Cette thèse s'inscrit dans ce contexte : elle vise à participer à une meilleure représentation des processus du transfert des produits phytosanitaires à l'échelle du versant par la modélisation spatialisée, permettant de mieux rendre compte des principales voies de transfert dans les terrains agricoles, en adoptant une approche simplifiée, mais qui permettra à terme de représenter les discontinuités existantes (bandes enherbées, fossés, talus... etc). En effet, ces discontinuités, qui peuvent jouer le rôle de solutions correctives (zones tampons), peuvent influencer notablement les flux d'eau et de pesticides, et il nous semble donc important de bien les prendre en compte. De nombreuses questions se posent sur les choix de la modélisation à développer dans cette étude, en s'inspirant des études précédentes en modélisation spatialisée, en particulier hydrologique (Jankowsky, 2011; Branger *et al.*, 2013; Vannier *et al.*, 2014; Labbas, 2015) et incluant la représentation des pesticides (Branger *et al.*, 2006a).

- *à quelle échelle modéliser?*

L'échelle du bassin versant reste encore difficile à appréhender, compte tenu de la complexité des processus en jeu. La modélisation à l'échelle de la parcelle, quant à elle, se heurte à la méconnaissance des conditions aux limites, difficiles à déterminer et pourtant très influentes. Ainsi, le choix de l'échelle s'est porté sur celle, intermédiaire, du (petit) versant, qui permet d'intégrer l'ensemble des processus advenant dans le compartiment « terrestre » de l'eau et des pesticides.

- *un modèle continu ou événementiel ?*

Le choix de développer un modèle continu (en opposition à événementiel) vient également de la difficulté à déterminer les conditions initiales pour un modèle événementiel, alors qu'elles ont une influence sensible sur les résultats de modélisation.

- *quel degré de complexité ?*

Pour ce travail, nous avons choisi de représenter le devenir des pesticides sur l'ensemble d'un versant avec un degré de complexité abordable, en représentant les principaux processus. En effet, l'objectif à long terme n'est pas de représenter le plus finement possible les processus, ce qui nécessiterait une paramétrisation très importante généralement peu accessible, mais de pouvoir utiliser l'outil développé pour tester des scénarios d'aménagement en intégrant ou en déplaçant des éléments du paysage relativement facilement.

Pour cela, il est nécessaire de rester sur des unités hydrologiques assez grossières, et de représenter les processus hydrologiques dominants (écoulements de surface, subsurface, infiltration) par des équations robustes (Richards, Darcy, ...) tout en simplifiant certains processus (par exemple, une adsorption linéaire pour représenter l'adsorption des pesticides sur la phase solide du sol). A contrario, nous souhaitons représenter les écoulements préférentiels via les macropores, car il est maintenant reconnu qu'ils jouent un rôle essentiel dans certains cas de transfert important de produits phytosanitaires dans les sols, parfois même plus important que le rôle de la matrice dans les sols à texture fine (Villholth *et al.*, 2000; Kördel *et al.*, 2008; Beven and Germann, 2013). Comme cet aspect est novateur, plusieurs fonctions et plusieurs degrés de complexité seront testés.

Nous faisons ainsi dans cette thèse l'hypothèse que représenter l'ensemble des processus impliqués, même de façon simplifiée, permettra de faire émerger les processus dominants le devenir des pesticides à l'échelle du versant.

- *quel type de modélisation utiliser ?*

Pour la représentation du versant et des éléments qui la composent, une modélisation « objet », ou plateforme de modélisation, semble particulièrement adaptée, car elle permet par définition de connecter différents processus et objets du paysage (Branger *et al.*, 2010). Ce type d'outil permet de diminuer les problèmes de couplage entre processus (écoulements surface/subsurface, double perméabilité, ...), de gestion du temps, et facilite *a priori* le développement de nouvelles composantes, sans devoir reprogrammer le préexistant, par comparaison aux modèles mécanistes 2D ou 3D qui n'ont pas été programmés en vue d'être couplés avec de nouvelles équations. De plus, ce type de modélisation correspond à la démarche adoptée dans cette thèse de garder la possibilité de simplifier la formalisation de certains processus. La plateforme hydrologique choisie dans cette thèse est CMF (Catchment Modelling Framework) développée à l'université de Giessen en Allemagne (Kraft *et al.*, 2011). Cette dernière se présente comme une « boîte à outils » de modélisation hydrologique et propose une grande variété d'équations physiques pour la représentation des processus hydrologiques à différentes échelles (équations de Richards Darcy, onde cinématique, etc.). Elle est open-source et facilite ainsi le développement de nouveaux modules à connecter. Les variables d'état simulables dans CMF étaient à l'origine limitées aux variables hydrologiques, mais au cours de cette thèse, la plateforme CMF a été réadaptée pour représenter également des variables de qualité de l'eau.

- *comment valider le modèle ?*

La validation du modèle interviendra à chaque étape de développement d'un nouveau module ou d'une connexion. On s'attachera également à valider des modules hydrologiques existants dans la version initiale de CMF, celle-ci étant relativement récente et n'ayant pas été testée sur de nombreux cas agro-pédo-climatiques. Les données disponibles à cette échelle sur l'ensemble des variables et pour les processus représentés (représentation de la double perméabilité, du ruissellement, de l'infiltration, des écoulements de subsurface, de l'adsorption, etc.) sont rares. De fait, la validation par données réelles sera relativement qualitative et basée sur l'expertise. En effet, on s'attachera à s'approcher d'un versant réel, le versant

expérimental d'Irstea dans le bassin de la Morcille (69), très riche en données acquises sur quinze ans, et qui permettra de vérifier la cohérence et la vraisemblance des simulations. La validation strictement quantitative ne pourra toutefois se faire qu'en confrontant le modèle à d'autres modèles mécanistes validés et reconnus par la communauté (Cathy, Sulis *et al.*, 2010 ; Hydrus2D, Simunek *et al.*, 1999 et Simunek *et al.*, 2001). Cette validation sera basée, parfois, sur des scénarios publiés, garantissant un cadre strict, rigoureux et scientifique. Pour la représentation de la double perméabilité, il n'existe à notre connaissance aucun moyen de valider les résultats par des données à l'échelle visée, elle sera donc également confrontée à des résultats de modélisation.

Ainsi, pour répondre aux objectifs de cette thèse, nous avons opté pour une modélisation hydrologique spatialisée modulaire permettant une représentation simplifiée des processus dominant l'écoulement de l'eau et le transfert des pesticides des terrains agricoles vers les eaux de surface, ainsi que les éléments du paysage. Le développement à l'échelle du versant s'appuie sur un versant expérimental Irstea situé dans le bassin de la Morcille (69), permettant d'assurer un aspect réaliste, de fixer les ordres de grandeur et d'aider au choix de certains paramètres.

Le travail de modélisation dans la plateforme CMF s'est organisé en plusieurs étapes, en commençant par l'eau puis en complexifiant progressivement la représentation des processus : développement d'un module de double perméabilité et de fonctions d'échange matrice-macropores, puis ajout du transport des solutés (non réactifs, puis réactifs) avec deux configurations possibles : simple porosité et double perméabilité. La validation a été faite selon les étapes de développement par comparaison avec d'autres modèles (Cathy, Hydrus1D/2D).

3. Plan du manuscrit

Ce mémoire est organisé en quatre chapitres. Le premier chapitre propose une introduction à la modélisation hydrologique et s'attache à démontrer l'intérêt de l'utilisation d'une plateforme hydrologique. Ce chapitre est suivi par une synthèse non exhaustive des plateformes hydrologiques existantes et utilisées dans la communauté hydrologique essentiellement européenne. Enfin, on présentera CMF, la plateforme choisie pour cette thèse.

Compte tenu de la nouveauté de CMF, du peu de travaux de validation ayant porté sur cette plateforme, et de l'absence de notice d'utilisation de la plateforme, nous avons choisi d'orienter le deuxième chapitre vers une comparaison de la réponse de CMF avec des modèles 2D et 3D. Dans un premier temps, nous avons comparé les résultats de CMF avec les résultats du modèle Cathy sur un benchmark (Sulis *et al.*, 2010). Cette comparaison est complétée par une seconde avec Hydrus2D sur un versant type en s'appuyant sur le versant expérimental de la Morcille (69).

Le troisième chapitre est consacré au développement d'un modèle à double perméabilité au sein de la plateforme CMF. Ce modèle est composé d'une fonction d'infiltration dans les macropores et de deux fonctions d'échanges entre micropores et macropores (deux possibilités de représentation).

Nous abordons dans le dernier chapitre le transport des solutés en simple et en double perméabilité avec des applications sur le versant de la Morcille. La validation est menée en comparant les résultats obtenus à ceux d'Hydrus1D/2D.

Ce mémoire se termine par une conclusion générale et des perspectives, où nous abordons les améliorations qui pourront être apportées à notre nouveau modèle à double perméabilité, ainsi qu'aux applications qui peuvent être envisagées pour apporter des réponses concrètes à la gestion des transferts de pesticides en milieu rural.

**Chapitre I : Représentation des processus de
transport hydrique advenant à l'échelle d'un
versant**

Chapitre I : Représentation des processus de transport hydrique advenant à l'échelle d'un versant

I.1. Contexte hydrologique

L'hydrologie des bassins versants s'est développée à partir des années soixante avec l'ambition de comprendre les mécanismes de genèse des débits et inscrire ainsi l'hydrologie dans une démarche scientifique et non plus simplement opérationnelle (Molénat, 2008). Le terme **Hydrologie** a été défini par Penman (1963), comme étant la science qui tente de répondre à la question, « *qu'est-ce qui arrive à la pluie ?* », en écho à Hewlett (1961), qui tentait de répondre à « *quelle est la provenance de l'eau des rivières ?* ». D'après Singh and Woolhiser (2002), la question de Penman paraît assez simple, mais les descriptions quantitatives du compartiment terrestre du cycle hydrologique peuvent devenir très compliquées et sont soumises à beaucoup d'incertitudes.

La modélisation hydrologique vise à représenter le comportement des bassins versants d'une manière proche de la réalité. La connaissance des mécanismes hydrologiques progresse grâce aux échanges entre la modélisation, les observations et l'expérimentation : des hypothèses sont tirées des observations pour formaliser la description des différents processus dominant le transport de l'eau, puis le modèle résultant testé sur de nouvelles données observées (Molénat, 2008). Par définition, un modèle hydrologique représente d'une manière simplifiée le cycle de l'eau dans un bassin versant, ce qui permet de simuler sa réponse hydrologique à des conditions climatiques spécifiques et parfois l'évolution conjointe de la qualité de l'eau. Mais la description de l'ensemble des processus se heurte à la complexité de la représentation des différents aspects physiques, chimiques et biologiques, et de leurs variabilités spatiales et temporelles (Ambroise, 1998). La structure et l'architecture du modèle sont plutôt déterminées en fonction de l'objectif pour lequel le modèle est conçu et de l'échelle à laquelle on souhaite représenter les processus (Kampf and Burges, 2007).

Les modèles représentant le transport et le devenir des solutés réactifs doivent en particulier rendre compte des processus se produisant dans les eaux de surface et dans la matrice du sol, ajoutant une couche de complexité. Ce chapitre est donc consacré à présenter une bibliographie des plateformes hydrologiques et l'approche qu'on souhaite adopter pour le transport de l'eau, en gardant à l'esprit notre volonté d'ajouter par la suite le transport des solutés. Celui-ci sera évoqué dans la dernière partie de cette thèse. Enfin, comme nous travaillerons à l'échelle du petit versant agricole, nous représenterons ici uniquement les processus associés à cette échelle.

I.1.1. Processus hydrologiques en jeu

Selon Ambroise (1999) l'ensemble des processus régissant le transfert hydrique dépend de la combinaison de plusieurs facteurs, que nous citons dans ce qui suit :

- La réponse d'un bassin versant dépend non seulement de la nature du forçage climatique (pluie, neige, évapotranspiration) mais également de son volume et de son intensité,
- Pour le même apport atmosphérique, la réponse du bassin versant dépend également des caractéristiques hydrodynamiques du sol, des types de végétations et de l'organisation spatiale de ces éléments,
- Le gradient topographique en surface et hydraulique en zone saturée interviennent fortement dans l'interaction entre les processus et dans les temps de transfert en surface et en subsurface.

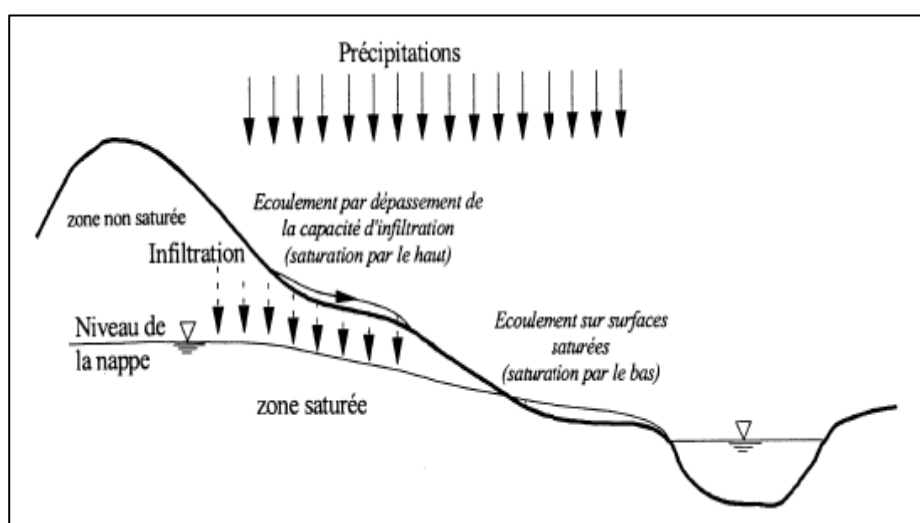


Figure 1 : Processus de génération du ruissellement (Musy, 1998).

Pour représenter les processus, la modélisation est un outil puissant qui permet une représentation simplifiée à différents degrés de complexité possibles. À l'échelle d'un versant et du bassin versant, les processus hydrologiques qui pourraient être simulés dans un modèle hydrologique distribué comprennent, à notre connaissance, le ruissellement de surface, les écoulements dans la zone saturée et non-saturée, les écoulements dans les canaux, l'évaporation et la transpiration (Figure 1) (Singh and Woolhiser, 2002; Kampf and Burges, 2007). Dans cette partie, nous proposons de décrire les processus que nous souhaitons prendre en compte dans la modélisation hydrologique, parce qu'ils nous semblent pouvoir jouer un rôle significatif dans le transport des pesticides.

Écoulement de surface

L'origine de la modélisation mathématique remonte à la méthode rationnelle développée par Mulvaney (1950) et un modèle événementiel par Imbeau (1892) pour relier le ruissellement à l'intensité des précipitations. Environ quatre décennies plus tard, Sherman (1932) introduit le concept de l'hydrogramme unitaire pour relier la réponse de ruissellement direct à la pluie excédentaire. Vers la même époque, Horton

(1933) a développé la théorie de l'infiltration afin d'estimer la pluie en excès et d'améliorer les techniques de séparation de l'hydrogramme.

Le processus du ruissellement de Horton se produit quand l'intensité de la pluie dépasse la capacité d'infiltration dans le sol (Horton, 1933). Cette approche a connu beaucoup de succès et a été adoptée dans plusieurs modèles hydrologiques. De nombreuses études de terrain ont pourtant montré que cette représentation, bien qu'assez répandue (Ambroise, 1999), correspond à un cas particulier. Par la suite, Linsley (1982) a complété la description du ruissellement en définissant le ruissellement non-hortonien comme étant le ruissellement par saturation, c.-à-d. qui advient quand le sol est saturé et que la pluie ne peut plus s'infiltrer.

Les équations représentant les écoulements à surface libre sont connues sous le nom d'équations de Saint-Venant (1871) pour l'écoulement de l'eau peu profonde. La résolution de ce système d'équation n'est pas évidente et nécessite une puissante capacité de calcul, ce qui a incité les modélisateurs à recourir à des approximations. Les trois approximations les plus utilisées des équations de Saint-Venant sont, par ordre de simplification croissante, l'onde dynamique, l'onde diffusante, et l'onde cinématique. L'approche de l'onde dynamique prend en compte la gravité, les forces de frottement et les forces de pression. Par ailleurs, l'onde diffusante peut être utilisée pour modéliser à la fois l'atténuation du pic de l'onde de crue en aval et les effets de remous en fonction du débit et de la confluence des différentes branches du réseau. Ainsi, elle nécessite la spécification des conditions aux limites amont et aval (Beven and Wood, 1993).

L'équation (I.1) montre les termes pris en compte dans chaque approximation :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho AV) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho AV^2) + A \frac{\partial p}{\partial x} + \tau P - \rho g A S_0 = 0 \quad (I.1)$$

└─┬─┘ Onde cinématique
└─┬─┘ Onde Diffusante
└─┬─┘ Onde dynamique

Où, ρ est la densité de l'eau ; A [L^2] est la section transversale ; V [LT^{-1}] est la vitesse de l'écoulement ; g [LT^{-1}] st l'accélération de la pesanteur ; P [L] est le périmètre mouillé ; S_0 [L] est la pente ; p [L] est la pression hydrostatique locale ; τ est le coefficient de frottement au fond.

Moussa and Bocquillon (1996) ont défini les zones d'approximation du système de Saint Venant et ont proposé une méthodologie pour le choix d'une combinaison entre les méthodes numérique, l'algorithme de résolution, le pas de temps et la discrétisation spatiale dans le cas de l'équation de l'onde diffusante. L'approximation de l'onde diffusante est efficace pour représenter l'écoulement des eaux de surface dans de nombreuses conditions, mais elle ne distribue pas les effets de remous correctement dans le temps, ce qui impacte la remontée rapide des hydrogrammes (Fread, 1993). Cette situation est préoccupante dans les canaux fluviaux plats mais elle a peu d'effet dans la plupart des situations d'écoulement de surface de versant. En revanche, l'approximation de l'onde cinématique aux équations de Saint Venant ne considère que les effets

de la gravité et du frottement sur les flux (Lighthill and Whitham, 1955; Singh, 1997). Elle représente un bon exemple de calcul numérique robuste, raison pour laquelle elle a été adoptée dans plusieurs modèles hydrologiques. Cependant, cette approche ne prend pas en compte les effets de remous/turbulence (Henderson, 1966; Beven, 1985) et est plutôt adaptée pour représenter les flux à faible pente ou dans les canaux (Freeze, 1972).

Infiltration

L'infiltration qualifie le passage de l'eau à travers les couches superficielles du sol, lorsque celui-ci reçoit une averse ou lorsqu'il est exposé à une submersion. L'eau d'infiltration remplit en premier lieu les interstices du sol en surface et pénètre par la suite dans le sol sous l'action de la gravité et des forces de succion. L'infiltration influence de nombreux aspects de l'hydrologie, du génie rural ou de l'hydrogéologie (Musy and Soutter, 1991). Parmi les facteurs influençant l'infiltration, nous pouvons citer le type du sol, la compaction de la surface du sol, la couverture du sol, ou encore son état d'humidité.

Parmi les premières théories de l'infiltration figure celle de Green and Ampt (1911), qui se base sur des principes simplifiés de la physique. D'autres modèles empiriques tels que ceux de Kostiaikov (1932), Horton (1933) et Philip (1957) qui ont été développés suivant des approches simplifiées et qui ont été adoptées dans plusieurs modèles. Par ailleurs, le premier modèle qui considère des écoulements variablement saturés était le modèle de Richards (1931, 1935). Une excellente perspective historique de l'évolution des idées dans ce domaine est donnée par Narasimhan (1998).

L'eau dans le sol est généralement représentée dans un modèle hydrologique sous la forme d'un écoulement à travers une matrice poreuse variablement saturée. L'équation utilisée pour décrire l'écoulement à travers une matrice saturée est la loi de Darcy, qui est remplacée pour un milieu poreux variablement saturé par l'équation de Richards. En raison de la difficulté de résoudre l'équation de Richards en plusieurs dimensions, plusieurs modèles hydrologiques ont proposé des simplifications. La plus courante est la prise en compte de la seule composante verticale pour les écoulements non saturés. Par ailleurs, de nombreuses approximations analytiques à l'équation de Richards ont été utilisées pour réduire les problèmes de résolution numérique et de temps de calcul.

Écoulements souterrains

Les écoulements saturés dans le sol sont modélisés par la loi de Darcy (1856), qui exprime la proportionnalité entre la densité de flux à travers un milieu poreux et son gradient de pression. Dans le cas des écoulements souterrains saturés, si on suppose que la variation de la charge hydraulique sur la verticale est négligeable, cette équation conduit au modèle de Boussinesq (1877). Cette approche considère que l'écoulement est verticalement hydrostatique et quasi plan ; l'équation de masse et la loi de Darcy peuvent alors être intégrées verticalement pour obtenir l'équation de Dupuit-Boussinesq en écoulement plan (x,y).

Des nappes peu profondes se développent en général dans les zones de fond de versant. Elles se rechargent rapidement par percolation des écoulements de surface ou par les écoulements subsurface provenant de l'amont, ce qui permet une remontée rapide des niveaux de nappe (remontée de la frange capillaire). Cette intumescence de la nappe entraîne alors une augmentation rapide du gradient de charge hydraulique de la nappe par temps de pluie, ce qui augmente considérablement la contribution de la nappe au cours d'eau (Sklash and Farvolden, 1979), et peut également favoriser le ruissellement par saturation.

Écoulements latéraux

L'infiltration verticale dans la matrice du sol peut être ralentie, voire arrêtée par la présence d'une rupture de perméabilité, liée à une diminution progressive de la porosité en profondeur ou à la présence d'une discontinuité dans la structure et / ou la texture du sol (substratum imperméable peu profond, horizon à taux d'argile plus élevé, horizon « cimenté »). Ceci implique la formation de nappes perchées favorisant les écoulements latéraux le long des versants, qui rejoignent les cours d'eau ou les nappes plus en aval (Ambroise, 1999).

Ce type d'écoulement est très localisé et généralement lent ce qui permet aux parties amont du versant de contribuer au débit de subsurface en bas du versant (Anderson and Burt, 1990). Ces écoulements englobent la contribution des horizons de surface partiellement ou totalement saturés en eau ou celle des nappes perchées temporairement présentes au-dessus des horizons argileux. Ces éléments de subsurface ont une capacité de vidange plus lente que l'écoulement superficiel, mais plus rapide que l'écoulement différé des nappes profondes (Musy and Soutter, 1991).

Écoulements préférentiels

Les écoulements préférentiels sont caractérisés par leur rapidité, et peuvent contribuer au transfert de solutés vers les eaux souterraines (Beven and Germann, 1982). Ils sont dus à la présence de macropores ou de fissures qui participent aux écoulements verticaux. Ils peuvent parfois conduire à des écoulements latéraux si des chemins horizontaux existent, comme des racines ou une hétérogénéité de la texture du sol.

Un milieu macroporeux est un milieu poreux où une partie des écoulements n'est pas soumise aux forces de capillarité, par suite de la présence de pores grossiers ou de fissures. Cela se traduit par une forte perméabilité et une porosité qui très localement peut approcher les 100% (Ababou and Trégarot, 2002). L'écoulement par macroporosité a vu son intérêt grandir auprès des hydrologues depuis une quinzaine d'années. A l'heure actuelle, tous les modèles ne représentent pas ces voies d'écoulement rapide dans la matrice, encore moins en deux ou trois dimensions. Nous reviendrons sur ces écoulements macroporeux et certains des modèles qui les représentent, avec des approches physiques ou conceptuelles (Beven, 1991a; Simunek *et al.*, 2003) dans le chapitre 3.

I.1.2. Typologie classique des modèles hydrologiques

Il existe plusieurs modèles hydrologiques du transport de l'eau, représentant également le transport des solutés pour quelques-uns d'entre eux. Plusieurs classifications ont été proposées au fil du temps pour ces modèles (Dawdy and O'Donnell, 1965; Clarke, 1973; De Marsily, 1994; Singh, 1995; Refsgaard, 1997; Ambroise, 1999) dont la première a été donnée par Clarke (1973). On y distingue dans un premier temps les modèles stochastiques (décrits par des variables aléatoires) des modèles déterministes (où les variables du modèle sont considérées comme globales à l'échelle des sous-systèmes). Les modèles stochastiques ou déterministes peuvent alors être classés comme conceptuels ou empiriques selon la description qu'ils font des processus. Par ailleurs, dans ces groupes, les modèles peuvent être linéaires ou non linéaires, et soit globaux, soit distribués/spatialisés. Kampf and Burges (2007) ont introduit des critères de classification des modèles distribués existants en fonction de leur représentation des processus, de la solution numérique adoptée, du couplage entre la surface et de la subsurface, et des pas employés pour discrétisation de l'espace et du temps. Strictement parlant, un modèle est dit distribué si tous les aspects du modèle sont distribués, y compris les paramètres, les conditions initiales et les conditions aux limites.

Globalement, en regroupant ces différentes classifications, on peut présenter les modèles hydrologiques existants en 5 familles dominantes, en se basant sur Ambroise (1999) :

- *Les modèles empiriques globaux* : ils donnent une vision globale sur le comportement d'un bassin versant en le considérant comme étant une seule entité hydrologique. Ils ne dépendent que des variables d'entrée et de sortie, sans prendre en compte les caractéristiques physiques du bassin versant. Il s'agit en général de modèles très opérationnels, qui peuvent avoir été déduits de modèles plus complexes, de réseaux de neurones, ou de méthodes basées sur les fonctions de transfert, comme l'hydrogramme unitaire (Post *et al.*, 1996). Considérant le bassin comme une boîte noire, ils ne conviennent pas du tout à son analyse interne.
- *Les modèles conceptuels globaux* : ils sont présentés, en général, comme étant un ensemble de réservoirs connectés entre eux par des lois de vidange de nature empirique, en respectant idéalement la loi de conservation de la masse. L'utilisation de paramètres moyennés ou globaux ne permet pas de rendre compte de l'hétérogénéité des bassins, ce qui peut conduire à une représentation grossière de la réponse hydrologique des bassins versants. Ces modèles sont apparus dans les années 1960 sous le nom des modèles conceptuels ou à réservoir, tel que la série des GRs (Edijatno and Michel, 1989) ou SWM (Crawford and Linsley, 1996).
- *Les modèles conceptuels semi-spatialisés* : le système y est considéré comme un ensemble de réservoirs connectés entre eux, où chaque réservoir est considéré comme homogène du point de vue de ses caractéristiques physiques, et qui est censé avoir la même réponse hydrologique.

L'identification des URH¹ se base sur deux principes : le premier consiste en la définition des unités de production homogènes obtenues par croisement des caractéristiques topographiques, l'occupation du sol, la pédologie, etc. Le deuxième principe considère que les URH de même type se caractérisent par la même réponse hydrologique. Les modèles qui se basent sur les URH sont essentiellement conçus comme la juxtaposition de systèmes conceptuels globaux (CEQUEAU-ORSTOM (Morin *et al.*, 1981)). Ils permettent une représentation plus détaillée du fonctionnement du bassin, mais pas son explication.

- *Les modèles physiques spatialisés* : ce type de modèle utilise des variables d'état, reliées par des équations d'état souvent exprimées sous forme de dérivées partielles. Ces équations décrivent la conservation de la masse, des moments et/ou de l'énergie (Kavvas *et al.*, 2004), dans et entre les domaines de surface, de subsurface et souterrains. La résolution de ces systèmes d'équation nécessite la définition des conditions initiales (valeurs des variables au temps zéro) attribuées à chaque sous-système et des conditions aux limites (valeurs des variables aux bords du domaine). Cette approche a été développée initialement par Freeze and Harlan (1969) pour la modélisation des principaux processus hydrologiques, et a ensuite vu l'apparition des modèles physiques basés sur le couplage des processus entre plusieurs compartiments (modèles SVAT,² ou modèles explicitant les couplages entre les compartiments saturé et non-saturé). À partir des années 1980, plusieurs modèles déterministes spatialisés à base physique ont été développés ; ils prennent en compte l'ensemble des processus hydrologiques tels que le SHE (Système Hydrologique Européen (Abbott *et al.*, 1986)), IHDM (Institute Hydrology Distributed Model (Beven *et al.*, 1987)), ou Cathy (CATchment HYdrology (Bixio *et al.*, 2000; Camporese *et al.*, 2010)). Cependant, les limitations pratiques liées à la disponibilité des données et aux descriptions discrètes de la géométrie et des paramètres associés (pour se conformer à la grille de résolution numérique) ne permettent pas une caractérisation entièrement distribuée. Ceci a induit des simplifications, tout en gardant l'aspect de distribution spatiale sur les processus et les paramètres possibles, et a mené dernier groupe.
- *Les modèles physico-conceptuels semi-spatialisés*. Ceux-ci représentent un mélange intéressant de modélisation conceptuelle et de lois physiques : ils sont à base physique, décrivant les processus élémentaires réels, tout en simplifiant suffisamment cette description pour la rendre opérationnelle à l'échelle du bassin versant. Ils sont semi-spatialisés car basés sur des URH dont la détermination peut être basée sur des simplifications. Enfin, les processus peuvent être modélisés de façon stochastique ou empirique selon la connaissance que l'on en a et l'importance que l'on veut leur donner. On donne comme exemple Topmodel (Beven, 1995), SWAT (Arnold *et al.*, 1994), ACRU

¹ Unité de Réponse Hydrologique (URH) sont des sous-systèmes considérés comme homogènes de point de vu de leur réponse hydrologique

² Modèle SVAT : modèle de Transfert Sol Végétation Atmosphère

(Schulze, 1989). Dans le même esprit, les *plateformes de modélisation hydrologique* permettent de connecter différents modèles ou réservoirs décrivant les processus et les éléments du paysage.

Pour conclure sur cette typologie, les modèles hydrologiques à base physique ont suscité et suscitent encore de nombreuses critiques (Beven, 1989). En particulier, la validité de modèles utilisant des équations physiques à l'échelle du versant ou du bassin versant est fréquemment remise en cause car les équations utilisées représentent les processus à l'échelle du laboratoire (typiquement Darcy, 1856 et Richards, 1931) et sont basées sur des expérimentations dans des conditions particulières (Beven and Germann, 2013). Par exemple, l'expérience de Darcy a été menée en présence de l'air dans des cylindres en acier remplis de sable trié, en condition de saturation. Cette approche nécessite que l'écoulement soit laminaire, ce qui conduit alors à la linéarité entre le gradient hydraulique et la vitesse de flux. Si on peut admettre que cette approche est valable en zone saturée et homogène, l'application en zone non-saturée, en conditions de terrain hétérogènes et non-linéaires à différentes échelles rend la définition des paramètres difficiles (Carlier, 1998). Cependant, ces approches mathématiques classées comme physiques conduisent à des résultats intéressants en termes de prédiction de la réponse des bassins versants. Il faut simplement bien garder en tête que les paramètres de ces équations sont des « pseudo-paramètres » adaptés à l'échelle, et ne correspondent pas exactement à leur signification physique première.

I.1.3. Cahier des charges

Avant le choix du modèle approprié, celui de l'échelle de la modélisation est très important, car il permet de préciser les processus hydrologiques à considérer compte tenu des objectifs. Dans notre cas, il s'agit d'étudier les processus gouvernant le devenir des pesticides dans les terrains agricoles suivant une approche simplifiée tout en adoptant une approche spatialisée. Singh and Woolhiser (2002) considèrent qu'un bassin versant peut être aussi petit qu'un lit de cours d'eau ou aussi grand que le bassin du fleuve Mississippi, c.-à-d. des centaines de milliers de kilomètres carrés. Les processus hydrologiques sont d'autant moins uniformes au sein d'une maille que la taille du bassin versant est grande, l'hétérogénéité intra-maille ne peut en effet être représentée.

Les modèles locaux, généralement à une dimension tels que MACRO (Jarvis *et al.*, 1997), Hydrus 1D (Simunek *et al.*, 1999) ou BROOK90 (Federer, 1995) offrent une description des phénomènes sur un seul profil de sol. Par construction, il est difficile d'y représenter l'effet de conditions aux limites ou encore des transferts latéraux (entrants et / ou sortants). Ceci nous paraît limitant en raison de l'importance des interactions latérales dans les transferts subsurfaciques et il nous semble donc nécessaire de pouvoir en rendre compte (Kraft, 2012). En principe, un modèle à l'échelle d'un bassin versant semble le plus approprié. Toutefois, la non-linéarité des domaines d'écoulement, les limitations des techniques de mesure, l'identification des paramètres et de la structure du sol en tout point posent des problèmes actuellement encore non résolus (Beven, 1995; Beven, 2001). De plus les modèles hydrologiques existants demandent une puissance de calcul très importante. Compte tenu de ces éléments, nous avons choisi l'échelle d'un versant pour le développement de notre modélisation. Ce choix nous permet de représenter les processus dominants

la réponse hydrologique à l'échelle d'un versant, en s'abstrayant des problèmes de méconnaissance des conditions limites amont et aval rencontrés par les modèles simulant le devenir des pesticides à l'échelle de la parcelle.

En étudiant la modélisation de la réponse des versants ou des petits bassins versants, Beven (1989) a mis en avant des problèmes fondamentaux dans l'application des modèles à base physique, et la limite que ces derniers peuvent atteindre pour se rapprocher de la réalité, de par la forte hétérogénéité qui s'exprime au sein des bassins. La modélisation hydrologique s'est alors orientée vers de nouvelles approches, qui se situent au-delà des modèles cités dans la classification précédente, afin de prendre en compte l'hétérogénéité de façon plus adaptée. L'une d'elles consiste à adopter une représentation modulaire des éléments du bassin versant, afin de permettre plus de flexibilité dans la représentation de la non-linéarité des processus. Dans la dernière décennie, l'approche que l'on appellera « orientée-processus³ » a été discutée par plusieurs auteurs. Par exemple, Buytaert *et al.* (2008), Clark *et al.* (2011) et Kraft *et al.* (2008) mettent tous l'accent sur l'importance de la modularité des modèles pour faciliter leur mise en œuvre et permettre le test et le rejet éventuels d'hypothèses relatives aux processus en jeu. L'idée est de réaliser un découpage basé sur la variation attendue dans la réponse hydrologique des éléments, et qui s'appuie donc sur l'occupation du sol, la topographie, la pédologie, les éléments du paysage,...etc. L'objectif est d'appréhender au mieux le comportement du bassin versant et de pouvoir représenter d'une façon proche de la réalité les processus hydrologiques pour chaque élément du paysage, notamment les connexions existantes en surface et en subsurface (voir *Figure 2*).

En pratique, l'approche orientée-processus est apparue avec le développement des plateformes hydrologiques. Cette dernières offrent plus de flexibilité pour la représentation des processus adaptée à chaque URH et parfois plus de puissance de calcul via le couplage des modules ou des fonctions généralement indépendants (structure, pas de temps ...etc) tel que dans la plateforme LIQUID (Branger *et al.*, 2007). Les plateformes sont relativement diversifiées et comportent chacune leur atouts et inconvénients (concepts développés, pas de temps, langage de programmation, solveur, ...). Elles sont décrites dans la partie suivante.

³ Orienté-processus consiste à adopter le processus adéquat à chaque élément du paysage.

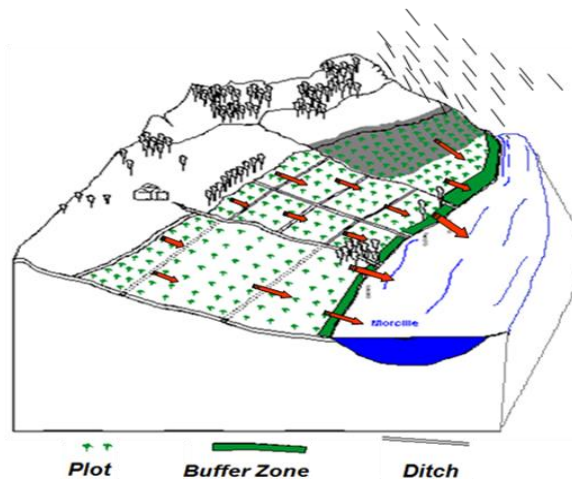


Figure 2 : Présentation modulaire d'un versant en pente (CORPEN, 2007).

I.1.4. Conclusion

Nous avons présenté les principaux processus impliqués dans le transport hydrique des pesticides. D'autres processus peuvent être considérés à l'échelle d'un versant tel que le drainage, l'irrigation ...etc. Dans ce travail, la démarche choisie consiste à représenter et valider l'ensemble des processus généralement présents dans les bassins versants agricoles et à permettre aux futurs utilisateurs de rajouter de la complexité pas à pas.

La modélisation hydrologique est un outil qui permet de tester et de valider des connaissances via la comparaison avec des données de terrain pour mieux identifier les chemins d'écoulement et construire un formalisme mathématique représentatif des processus pertinents à différentes échelles. Cependant, la simplification de certaines approches mathématiques est indispensable pour des raisons numériques ou de paramétrisation, en particulier lorsque l'on se confronte à la complexité des discontinuités existantes liées aux éléments du paysage agricole, qui n'a été qu'assez récemment intégré. Parmi les exemples qu'on peut citer, l'effet des haies et talus a été pris en compte par Viaux (1999) via une adaptation du modèle Topmodel, Carluer and De Marsily (2004) ont adapté le modèle Topog pour la représentation de l'influence des fossés et des talus dans un bassin versant et Branger *et al.* (2009) ont développé un module pour rendre compte de l'effet du drainage dans les parcelles agricoles. Pour conclure, l'adoption de l'approche orienté-processus semble adaptée à notre problématique car elle permettrait d'associer les processus appropriés pour chaque élément du paysage. Nous lui consacrons le reste de ce chapitre.

I.2. Etat de l'art des plateformes hydrologiques

I.2.1. Etat de l'art

Le développement des modèles hydrologiques a été souvent orienté par des applications relatives à des projets de recherche. D'autres modèles peuvent par contre avoir été développés dans un objectif de gestion plutôt que de compréhension des processus. Le plus souvent, les chercheurs sont conduits à développer un nouveau modèle ou adapter un modèle existant car la plupart des modèles hydrologiques conceptuels pré-existant ont été développés pour des objectifs particuliers, et sont adaptés à un type de bassin versant et une problématique particulière (Krause, 2002). Dans la majorité des cas, les structures des différents modèles ne sont pas conçues avec l'objectif de pouvoir ensuite les adapter ou les étendre en vue de la prise en compte ultérieure d'autres processus, de nouvelles connaissances ou de nouvelles représentations en faisant intervenir d'autres jeux de paramètres. Les plateformes hydrologiques sont alors apparues à la fin (de la dernière décennie) du 20ème siècle, avec l'augmentation du besoin de modélisation de phénomènes couvrant plusieurs champs disciplinaires. Représenter en même temps plusieurs phénomènes physiques tel que le transport de l'eau et des solutés, la croissance de la végétation, l'effet de l'action de l'être humain dans le comportement des bassins versants ...etc ; suppose de simuler les interactions entre plusieurs processus et par conséquent de disposer d'un couplage très performant.

Une plateforme (ou « framework ») est définie comme étant un outil informatique qui permet la construction des modèles sur mesure à partir de modules réutilisables et interchangeables (Argent, 2004; Branger *et al.*, 2005). La différence entre les différentes plateformes existantes réside dans le fait qu'une plateforme peut être développée soit pour le couplage de modèles externes indépendants (OMS (Hatchings *et al.*, 2002) ; OpenMI (Westen *et al.*, 2004) ; PALM (Buis *et al.*, 2006)), soit pour le couplage de composantes existantes ou à développer au sein de la plateforme elle-même (ICMS (Rahman *et al.*, 2004) ; Tarsier (Waston and Rahman, 2004) ; TIME (Rahman *et al.*, 2003)). Une plateforme de modélisation hydrologique est alors un environnement de mise en œuvre de modèles hydrologiques, et sont dans la plupart des cas développées pour le couplage de modules internes représentant un ou plusieurs processus hydrologiques différents. L'imbrication des différentes composantes se fait suivant un ordre spatial et temporel qui dépend de la structure de la plateforme.

Parmi les plateformes existantes, on peut citer deux plateformes françaises : LIQUID (Branger *et al.*, 2009) qui a été développée par l'entreprise d'ingénierie logicielle HYDROWIDE et des laboratoires de recherche dont Irstea, et OpenFluid développé par le LISAH (Laboratoire d'étude des Interactions Sol - Agrosystème – Hydrosystème) à Montpellier. Par ailleurs, il existe d'autres plateformes hydrologiques dans le monde, dont deux plateformes allemandes : JAMS (Jena Adaptable Modelling System) à l'université de Jéna (Kralisch and Krause, 2006; Kralisch *et al.*, 2009) et CMF (Catchment Modelling Framework) développée à l'université de Giessen (Kraft *et al.*, 2011).

Parmi les modélisateurs d'une plateforme, on peut en général définir trois catégories (Branger, 2007):

- a) Les développeurs construisent les modules représentant les processus physiques sur la base des formules scientifiques.
- b) Les intégrateurs créent les modèles sur la base des modules existants.
- c) Les utilisateurs font fonctionner les modèles en introduisant leurs données.

Si ces trois catégories existaient par exemple typiquement pour LIQUID quand elle était en cours de développement, en tant que plateforme de collaboration entre différentes équipes travaillant sur différents projets, elles sont de manière plus générale plus ou moins concrètes selon les cas, selon les droits définis et les choix des développeurs (code open-source, modèle type « boîte noire », modèle de recherche, modèle développé pour différentes communautés, etc...). Ces critères sont à prendre en compte dans notre choix d'un outil spécifique.

Pour cette thèse, on recherche idéalement une plateforme qui permettrait au moins d'adopter une approche orientée-processus, et qui permettrait également, si cela s'avère nécessaire, de développer de nouveaux modules pour représenter les processus prédominants à l'échelle d'un versant. L'aspect modulaire permettrait la représentation du paysage et de ses éléments, mais également la possibilité de représenter les processus selon différents degrés de complexité, en optant pour des représentations mécanistes classiques ou au contraire simplifiées, selon les processus hydrologiques considérés. Outre les critères scientifiques, cela signifie que l'on aura donc besoin de pouvoir être à la fois un développeur, un intégrateur et un utilisateur de cette plateforme. Cela implique l'accès aux codes et le droit d'y développer librement (dans l'idéal, un code open source), que le langage de programmation soit accessible (Fortran, C++, Python, ...), et que les développeurs expriment la volonté de collaborer avec la communauté de recherche scientifique pour échanger et valider les nouveaux développements de manière dynamique. Ces derniers critères peuvent au premier abord paraître secondaires ; toutefois, des expériences passées ont démontré leur importance.

I.2.2. Quelques plateformes hydrologiques existantes

Ce qui suit présente brièvement les plateformes citées auparavant, puis expose le choix de la plateforme retenue pour la thèse et qui nous semble correspondre au mieux à notre philosophie et à la modélisation orientée-processus souhaitée. Cette bibliographie n'est pas exhaustive, et elle est orientée par les réflexions que j'ai eues au début de ma thèse lors de mon choix de l'outil de modélisation que j'utiliserais.

Remarque préalable sur le logiciel libre : compte tenu de la contrainte forte sur l'aspect libre pour le choix d'une plateforme de modélisation, il peut être utile de définir ou rappeler ce qu'on appelle un *logiciel libre* : un programme est qualifié de logiciel libre s'il permet à tout utilisateur de posséder les quatre libertés suivantes :

- la liberté d'utiliser le logiciel à n'importe quelle fin ;
- la liberté de modifier le programme pour répondre à ses besoins ;

- la liberté de redistribuer des copies ;
- la liberté de partager avec d'autres les modifications faites.

On trouve le plus souvent parmi les licences auxquelles sont soumises les plateformes, la licence GNU General Public License (GPL), qui peut être déclinée selon différentes versions. La licence GPL et les différentes versions sont par exemple très bien expliquées sur le site de gnu.org, ainsi que la liste de l'ensemble des licences existantes⁴.

I.2.2.1. LIQUID

La plateforme de modélisation LIQUID (Viallet *et al.*, 2006; Branger *et al.*, 2009) dédiée à la modélisation des phénomènes physiques en hydrologie et en environnement, a été conçue par l'entreprise d'ingénierie logicielle Hydrowide, en partenariat avec le laboratoire LTHE (Laboratoire d'étude des Transfert en Hydrologie et Environnement) à Grenoble, Irstea (Institut national de Recherche en Sciences et Technologies pour l'Environnement et l'Agriculture) et l'IFSTTAR (Institut Français des Sciences et Technologies des Transports, de l'Aménagement et des Réseaux). Son développement s'est arrêté en 2011, suite au dépôt de bilan de la société Hydrowide.

La plateforme LIQUID permet le développement et la mise en œuvre de modèles hydrologiques, construits à partir de modules couplés entre eux et développés en interne (pas de couplage avec des modules externes). Chaque module, qui constitue une brique élémentaire, peut décrire un processus particulier (ruissellement, infiltration, etc.), un ensemble de processus dans un élément (comme une haie, une parcelle), ou un transfert entre différentes mailles. Il représente une entité autonome, dispose de sa propre structure de données, et est capable de gérer son propre pas de temps et de communiquer avec d'autres modules via des slots et des signaux dont le nombre de connexions n'est pas limité. Les slots sont les entrées du solveur et les signaux sont les variables de sortie calculées par le solveur (Branger *et al.*, 2006b; Branger *et al.*, 2008; Branger *et al.*, 2010). Le langage utilisé est le C++.

Chaque module dans LIQUID peut être découpé en trois entités : un schéma de données, un pré-processeur pour le traitement de données spatialisées, et un solveur pour la résolution des calculs. Ceci lui confère une bonne capacité de calcul avec une adaptation du pas de temps de calcul interne pour chaque processus (*Figure 3*). Ce schéma de données prend en compte les données spatialisées (MNT, propriétés du sol, etc.), permettant de créer des tables dans la base de données PostgreSQL, qui seront lues par la suite à l'aide du pré-processeur. Celui-ci envoie de son côté l'information au solveur sous forme de paramètres et de variables d'état. Le pré-processeur génère également le maillage décrit au préalable dans la base de données

⁴ Licence GPL : <https://www.gnu.org/licenses/quick-guide-gplv3.fr.html>

Liste des licences : <https://www.gnu.org/licenses/license-list.fr.html>

(schéma de données) pour les modules nécessitant une résolution sur un domaine discrétisé (équations aux dérivées partielles).

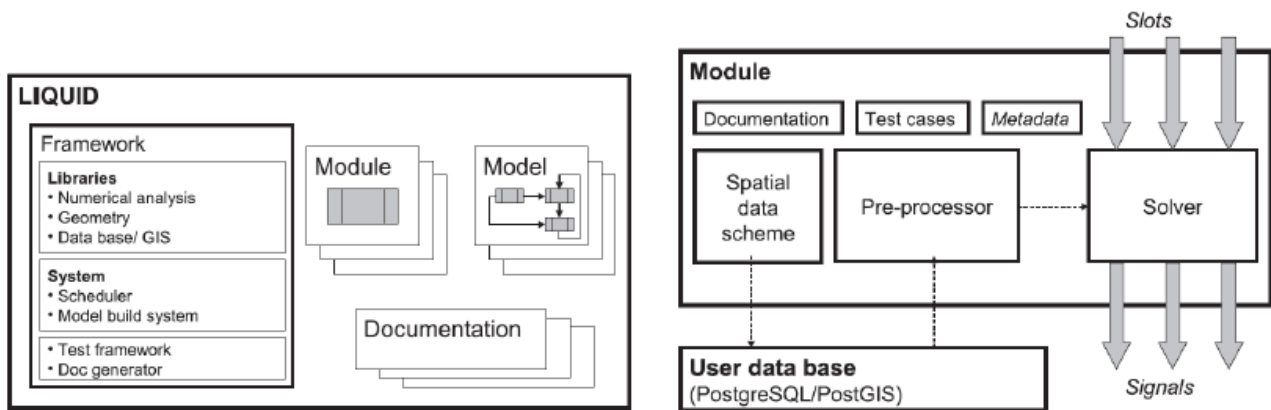


Figure 3 : Composantes de la plateforme de modélisation LIQUID (gauche) et représentation schématique d'un module (droite) d'après Branger et al. (2009).

La gestion du pas de temps de calcul à l'intérieur de la plateforme est spécifique à chaque module en fonction du processus décrit et peut varier plus ou moins rapidement dans le temps. En revanche, la plateforme contient un ordonnanceur (time scheduler), qui permet la coordination entre les pas de temps adoptés pour chaque module. Cette gestion performante du pas temps interne adapté à chaque processus est une particularité forte de cette plateforme par rapport aux autres. Le couplage spatial entre les modules est défini par des modules « interface », permettant l'indépendance notamment temporelle de chaque processus. Le fonctionnement de la plateforme est décrit beaucoup plus en détail dans les thèses de Branger (2007), Dehotin (2007), Jankowfsky (2011) et Vannier (2013), ainsi que d'autres travaux qui ont contribué au développement de plusieurs modules dans LIQUID, en particulier au sein d'Irstea (Braud et al., 2010).

Pour conclure, de par son aspect modulaire, sa flexibilité dans les choix de représentation des processus, des pas de temps et d'espace, et de par son développement en forte collaboration avec Irstea, la plateforme LIQUID correspondait à notre cahier des charges, et était le premier choix pour répondre à nos objectifs. Cependant, le développement de nouveaux modules est devenu impossible suite au dépôt de bilan de la société, au début de ma thèse. Il a donc fallu rechercher une nouvelle plateforme répondant également à nos critères.

I.2.2.2. OpenFluid

OpenFluid est une plateforme développée par le LISAH (Laboratoire d'étude des Interactions Sol - Agrosystème - Hydrosystème) de Montpellier. Elle est destinée à la modélisation et à la simulation de flux dans le paysage, en particulier les processus générant des flux dans les bassins anthropisés, sur une période temporelle donnée (Fabre et al., 2010). La plateforme est basée principalement sur le modèle hydrologique *MHYDAS* (Modélisation HYdrologique Spatialisée pour les AgroSystèmes (Moussa et al., 2002; Moussa et al., 2006; Bouvet et al., 2010), qui est un modèle déterministe, spatialement distribué, développé pour étudier les effets des aménagements agricoles sur le comportement hydrologique de bassins versants

anthropisés à différentes échelles, de la parcelle au bassin versant, pour des événements pluvieux ou pour une échelle annuelle ou pluri-annuelle (Moussa *et al.*, 2002). La plateforme simule les flux d'eau, de pesticides et l'érosion. L'organisation spatiale est particulièrement étudiée dans Openfluid. La discrétisation est basée sur la décomposition du domaine d'étude en unités de réponse hydrologique en fonction des hétérogénéités et des discontinuités hydrologiques existantes dans les bassins versants agricoles (Moussa *et al.*, 2002). On dispose de trois types d'unités hydrologiques : unité de surface « SU », unité de nappe « GU » et unité de tronçon « RS », qui représente les fossés (*Figure 4*).

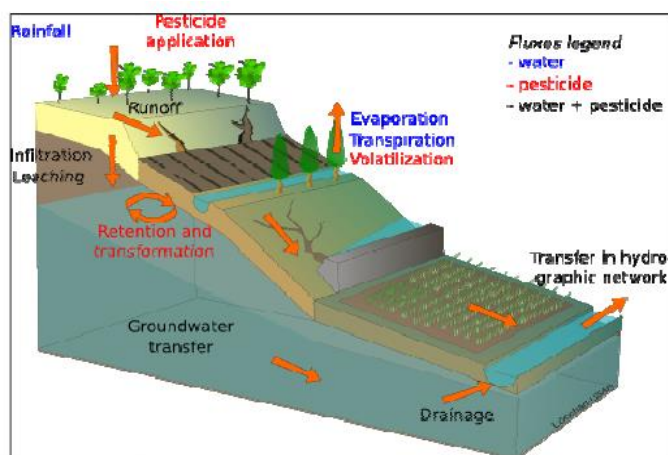


Figure 4 : Flux modélisés avec MHYDAS.

La discrétisation est obtenue en superposant l'information géographique disponible sur les sous bassins à partir d'un MNT (modèle numérique de terrain), les cartes pédologiques et d'occupation du sol. La connexion entre les unités du paysage est réalisée à l'aide d'un système de fossés qui assure le cheminement de l'écoulement jusqu'à l'exutoire du bassin versant suivant la topologie. Le modèle hydrologique **Geo-MHYDAS** est l'outil SIG qui permet aux utilisateurs de MHYDAS d'effectuer cette subdivision du paysage complexe avant d'exécuter le modèle. La méthodologie suivie, décrite dans Lagacherie *et al.* (2010), est la suivante :

- prise en compte à la fois des caractéristiques du paysage naturel et anthropique, avec des unités de tailles différentes ;
- obtention des unités hydrologiques linéaires et polygonales par une procédure de nettoyage sélectif permettant de négliger les unités de petites tailles ;
- conceptualisation de la topologie en surface suivant un arbre orienté, suivant la pente, ou suivant des choix de calcul, ce qui assure le cheminement des flux vers l'exutoire.

Le couplage temporel au sein de la plateforme est réalisé avec un pas de temps constant tout au long de la simulation. Cependant, le pas de temps de calcul interne des fonctions peut être différent. La plateforme, sous licence GPL (v3), permet l'utilisation et le couplage des fonctions de simulation qui y ont été développées ainsi que l'encapsulation avec d'autres modules ou modèles écrits en C++ ou un autre langage compatible tel que Fortran, C ou Python. Ces codes encapsulés sont parfois exécutés à l'intérieur de la plateforme s'ils ne gèrent pas leurs propres pas de temps.

Pour conclure, OpenFluid est un outil très performant pour la modélisation des bassins versants agricoles, en particulier grâce au découpage spatial qui peut être fait avec une grande précision à l'aide de l'outil Geo-MHYDAS. La plateforme est cependant relativement complexe à prendre en main, et en particulier l'ajout de nouveaux modules nécessite *a priori* de travailler de très près avec les développeurs. Même si « l'esprit de cette plateforme » va dans ce sens, elle ne semble pas pour l'instant permettre un travail autonome et à distance d'autres chercheurs pour ajouter les fonctions que l'on souhaite, coder de façon indépendante, compiler l'outil, et l'appliquer sur notre domaine. De plus, pour l'instant, elle a surtout été validée dans un contexte méditerranéen.

I.2.2.3. JAMS

JAMS (Jena Adaptable Modelling System) est une plateforme de modélisation hydrologique développée à l'université de Jena, en Allemagne, dont la base est un modèle hydrologique à réservoirs J2000 (Kralisch and Krause, 2006). Elle peut être utilisée pour construire des modèles « à la carte », tels que le modèle hydrologique J2000, le modèle de bilan hydrique simplifié J2000g et le modèle distribué de transport des nutriments orienté-processus J2000s (Bende-Michl *et al.*, 2006; Fink *et al.*, 2007; Krause *et al.*, 2009). Les modèles sont construits en couplant plusieurs modules suivant un ordonnancement dans l'espace et dans le temps. Les simulations sont continues et peuvent être à pas de temps horaire, journalier ou mensuel. JAMS comprend des modules permettant la représentation de l'occupation du sol, l'optimisation du modèle, l'analyse de sensibilité ou d'incertitude, ainsi que des outils de visualisation 2D/3D.

De même que dans Openfluid, la discrétisation spatiale est obtenue par la superposition de plusieurs cartes (MNT, géologie, occupation du sol, type de sol) à partir desquelles s'effectue le découpage suivant un maillage irrégulier en unités de réponse hydrologiques (URHs) considérées comme homogènes du point de vue des processus hydrologiques. Le routage des flux, de l'amont vers l'aval, est calculé en s'appuyant sur les HRU et les brins de rivière (Reach). Les flux sont représentés pour 4 composantes qui sont routées séparément : ruissellement de surface, écoulement de subsurface rapide, écoulement de nappe superficielle et écoulement de nappe profonde. Les fonctions de flux sont des lois simplifiées reliant les entrées et les sorties de chaque unité suivant une approche très conceptuelle.

Au départ adapté pour répondre à des études globales et à grande échelle, le pas de temps était journalier. Il a été modifié récemment dans la version de Labbas (2015) pour répondre à des problématiques de transferts plus rapides dans un bassin versant péri-urbain.

Les modules dans JAMS ont une structure indépendante : leur interaction se fait à l'aide d'un système d'échange de variables. Par ailleurs, la plateforme contient un système central qui gère plusieurs bibliothèques de modules et l'exécution des modèles (Labbas, 2015). Une interface graphique permet à l'utilisateur de construire un modèle et de gérer ses données (*Figure 5*).

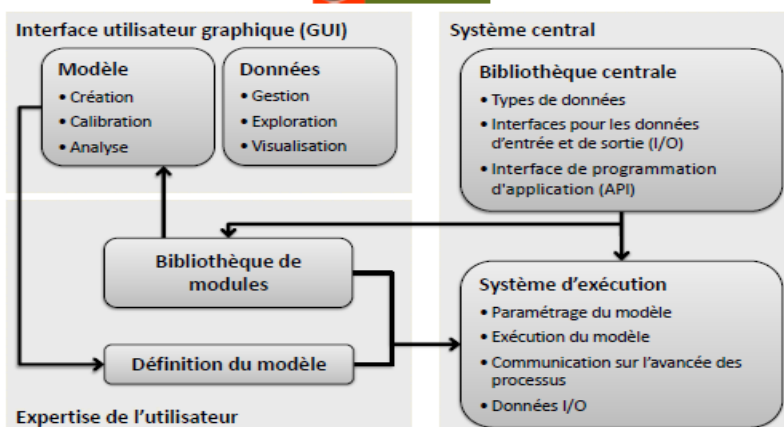


Figure 5 : Fonctionnement de la plateforme de modélisation JAMS (Kralisch, 2012).

La plateforme JAMS est en libre accès (sous licence LGPL - GNU Lesser General Public License, qui est semblable à la licence GPL à la différence qu'elle permet l'intégration de modules non libres), son interface est facile à prendre en main, et permet de coupler aisément les modules. Ces avantages lui confèrent un caractère collaboratif important, comme en témoigne en particulier le co-développement qui rassemble les chercheurs de l'Université de Jena et ceux d'Irstea Lyon-Villeurbanne (Branger *et al.*, 2013; Labbas, 2015). La plateforme de modélisation JAMS représenterait donc un choix stratégique pour la thèse compte tenu de cette collaboration préexistante et de nombreux travaux collaboratifs dans le monde, ainsi que de la réactivité des développeurs à l'université de Jena. Cependant, les types affectés à chaque URH sont très globaux : forêt, zone urbaine, etc., ainsi le découpage est très grossier. De plus, l'approche très conceptuelle adoptée pour la représentation des processus ne nous paraît pas adaptée à l'approche à l'échelle envisagée du versant.

I.2.2.4. Catchment Modelling Framework

Catchment Modelling Framework (CMF) est une plateforme hydrologique développée par Philipp Kraft et l'Institute of Landscape Ecology and Resources Management, Justus-Liebig de l'Université de Giessen (Kraft *et al.*, 2011). Elle est définie sous la licence GPLv3 et est téléchargeable sur le site web de l'université de Giessen⁵. CMF est définie par son auteur comme une boîte à outils hydrologique qui se veut à la fois en libre accès, portable, modulaire, et connectable à d'autres modèles. Pour construire un modèle hydrologique donné, on choisit les types de flux et de connexions que l'on souhaite appliquer entre les éléments du système, ces derniers étant assimilés à des réservoirs. La plateforme est codée en C++ pour les codes principaux et en Python pour le pre-processing (utilisation de couches spatialisées SIG). L'interface SWIG (Simplified Wrapper and Interface Generator) permet à l'utilisateur de créer son propre modèle sous Python en définissant les fonctions utilisées pour calculer les flux ainsi que les connexions assurées entre les

⁵ <http://fb09-pasig.umwelt.uni-giessen.de:8000/>

modules de CMF ; il permet par ailleurs l'interfaçage avec le code C++ (Beazley *et al.*, 1996). De nouveaux modules peuvent être développés en C++ et compilés à l'aide d'un compilateur C++ (Visual Studio 2008, Windows SDK). La plateforme est conçue pour que les fonctions soient autant que possible indépendantes entre elles, ce qui facilite leur modification ainsi que le développement de nouvelles fonctions. La plateforme a également été conçue pour être compatible avec le couplage de modèles externes (Kraft *et al.*, 2010).

CMF est structuré comme une interconnexion de plusieurs réservoirs de stockage d'eau et de conditions aux limites (voir *Figure 6*). Celles-ci peuvent être définies sous forme de conditions de Dirichlet, de Neumann, ou de conditions atmosphériques en surface. Les différentes connexions sont des fonctions représentant les flux résultants de l'état des sous-systèmes entre lesquelles elles adviennent, typiquement évapotranspiration, infiltration, et ruissellement de surface. Plusieurs fonctions peuvent être utilisées pour formaliser le même processus, selon le degré de complexité voulu. Ceci offre à la plateforme un caractère orienté-processus, qui permet de spécifier les processus adéquats à chaque sous-système. Sa structure permet le développement de modèles plus ou moins mécanistes, ainsi que leur adaptation en fonction des objectifs assignés à la modélisation envisagée en choisissant les fonctions de connexion souhaitées.

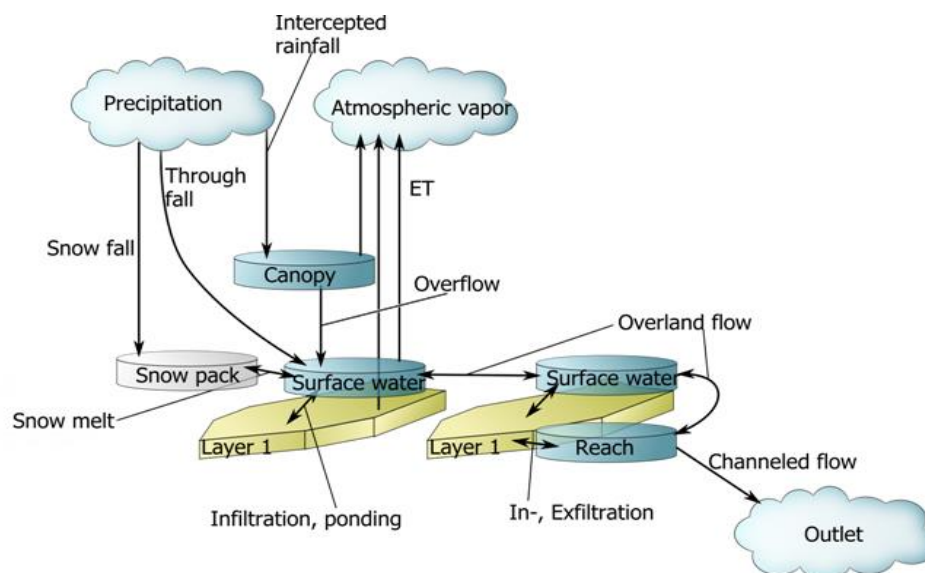


Figure 6 : Connexion des flux dans CMF (Kraft, 2012).

La description spatiale en surface dans CMF peut être basée sur un découpage de type maillage (chaque maille sera considérée comme une cellule par CMF) ou sur un découpage en éléments plus grossiers que l'on définit alors manuellement (par exemple, un découpage en sous-bassins). Dans les deux cas, chaque cellule est connectée à un réservoir de surface qui reçoit les conditions aux limites de surface ; chaque colonne de sol sous-jacente est ensuite discrétisée verticalement selon des couches pédologiques et numériques.

Le modèle est basé sur l'équation de transport avec conservation de la masse, qui est résolue par l'approche des volumes finis de Qu and Duffy (2007). Les fonctions représentant les flux sont basées sur des équations différentielles ordinaires, dont la résolution peut être effectuée via un des solveurs existants ; le

plus testé et le plus validé dans CMF est CVOICE⁶ (Cohen and Hindmarsh, 1996; Serban and Hindmarsh, 2005).

CMF est une plateforme récente qui a été utilisée dans plusieurs études de l'Université de Giessen. Par exemple, CMF a été couplé avec un modèle de croissance de plantes PMF - Plant growth Modeling Framework (Multsch S., 2011) et le modèle DECOMP (Wallman *et al.*, 2006) qui est un modèle semi-déterministe de décomposition de la matière organique (Kraft, 2012). Windhorst *et al.* (2014) ont appliqué CMF pour le transport convectif des traceurs de l'eau stable isotope O¹⁸ et H² à l'échelle d'un versant. Cependant, au-delà du laboratoire d'origine, on trouve peu d'utilisations et de validation de CMF, en particulier utilisant des fonctions que l'on souhaite utiliser : Darcy, Richards, et onde cinématique. Malgré la volonté du concepteur de développer un outil open-source et collaboratif, les tutoriels d'explication du fonctionnement, les codes tests de base, ainsi que les manuels pour la prise en main sont encore en cours de rédaction pour un certain nombre de fonctions. En revanche, Philipp Kraft a manifesté une grande volonté de collaboration avec nous pour l'utilisation de la plateforme ainsi que pour le développement de nouveaux modules, nécessaires pour mener ce travail de thèse.

I.2.3. Synthèse et choix de la plateforme pour la thèse

La plateforme LIQUID répondait à notre cahier des charges, mais elle n'est plus en cours de développement. La plateforme Openfluid est *a priori* bien adaptée à l'échelle et au type de petit bassin versant agricole tel que celui de cette étude, permettant une représentation très physique de l'infiltration par résolution de l'équation de Richards. Cependant, elle nous semble manquer de flexibilité pour ajouter les autres processus que l'on souhaite simplifier, en particulier les écoulements préférentiels. De plus, il semble que si l'on souhaite ajouter des éléments du paysage (tels que des bandes enherbées, des talus) à terme, cela nécessiterait un travail plus complexe que la simple utilisation des entités déjà définies (parcelle, rivière, fossé). D'autre part, l'aspect plutôt évènementiel et lié aux épisodes rapides et extrêmes des sujets de recherche usuellement associés à cette plateforme ne correspond pas à la modélisation continue que nous recherchons. Cette plateforme reste tout de même un outil très intéressant pour la comparaison des résultats, d'autant qu'elle a déjà été validée sur des bassins français, bien qu'essentiellement méditerranéens.

La plateforme JAMS, quant à elle, représente une opportunité très intéressante, notamment en termes de collaborations ; elle présente toutefois une approche très conceptuelle, explicitant les transferts entre les entités constituant le bassin versant suivant des lois simplifiées. JAMS n'est donc pas adaptée pour l'approche physique de certains processus visée dans le cadre de cette thèse. Cette synthèse n'est pas exhaustive, il existe d'autres plateformes de modélisation hydrologique qui ne sont pas décrites ici. On citera en particulier HYPE (Hydrological predictions for the environment), développée par le Swedish

⁶ <https://computation.llnl.gov/casc/sundials/main.html>

Meteorological and Hydrological Institute, qui est également en licence LGPL (Arheimer *et al.*, 2008; Lindström *et al.*, 2010). HYPE est plutôt spécialisée dans les études liées à l'agriculture, décrivant le devenir des nutriments (nitrates, phosphores) dans le sol, dans les cours d'eau et les lacs. Elle est essentiellement développée par ses créateurs au gré des demandes. Les coupleurs entre modèles plus orientés « développement informatique » que plateforme hydrologique, tels que OpenMI⁷ (Open Modelling Interface) ou Open-PALM⁸ (Projet d'Assimilation par Logiciel Multiméthode : coupleur dynamique parallèle) pourraient également constituer une alternative intéressante. Cependant, nous avons souhaité rester dans la communauté hydrologique en utilisant une plateforme spécifiquement dédiée au transfert d'eau en surface et subsurface, en considérant ce type d'outil comme une porte ouverte à la collaboration avec d'autres équipes, et permettant de mieux se concentrer sur la manière de représenter les processus plutôt que sur la partie couplage au sens informatique.

À l'issue de cet état de l'art, et afin d'adopter une représentation des éléments du paysage et des équations physiques à prendre en compte suivant une approche orientée-processus, la plateforme retenue pour ce travail de thèse est Catchment Modelling Framework (CMF). La plateforme répond aux objectifs visés par la modélisation et présente l'avantage d'adopter une représentation des processus suivant une approche simplifiée ou complexe selon les besoins. Elle permet un découpage du système modélisé en surface en mailles qui sont discrétisées verticalement en couches, ainsi que différents choix de connexions entre les éléments du paysage. La partie suivante décrit plus en détail CMF, notamment dans l'objectif de permettre à de futurs utilisateurs de reprendre ces explications qui se veulent complémentaires aux tutoriels du site de CMF.

I.3. La plateforme CMF (Catchment Modeling Framework)

I.3.1. Présentation générale et définitions

CMF est une librairie de codes hydrologiques permettant de construire des modèles hydrologiques adaptés à une problématique. On trouve sur le site internet de CMF⁹ un certain nombre de tutoriels, les codes sources, un wiki, et des exemples d'application. Cependant, il semble utile de décrire la plateforme plus en détail dans cette thèse par l'approche utilisateur, afin de comprendre quels ont pu être les avantages et inconvénients d'utiliser cet outil, mais également pour compléter sa présentation existante sur son site internet sur lequel toutes les fonctions utilisées ne sont pas explicitement décrites.

⁷ <http://www.openmi.org>

⁸ http://pantar.cerfacs.fr/globc/PALM_WEB/index.html

⁹ <http://fb09-pasig.umwelt.uni-giessen.de:8000/>

CMF est une adaptation de l'approche volumes finis (FVM) de Qu and Duffy (2007), qu'elle généralise en permettant à l'utilisateur de relier les volumes (décrits par des réservoirs, appelés « water storages ») par des équations de flux (flux connexions). La *Figure 7* présente la conceptualisation de CMF : les réservoirs de stockage y sont considérés comme des nœuds (flux_node) de même que les conditions aux limites. Ces nœuds sont connectés entre eux par des flux de connexion qui représentent l'infiltration, l'évapotranspiration, ou tout autre type de flux, par les équations de Richards, de Manning, de Penman-Monteith, etc. (Kraft, 2012).

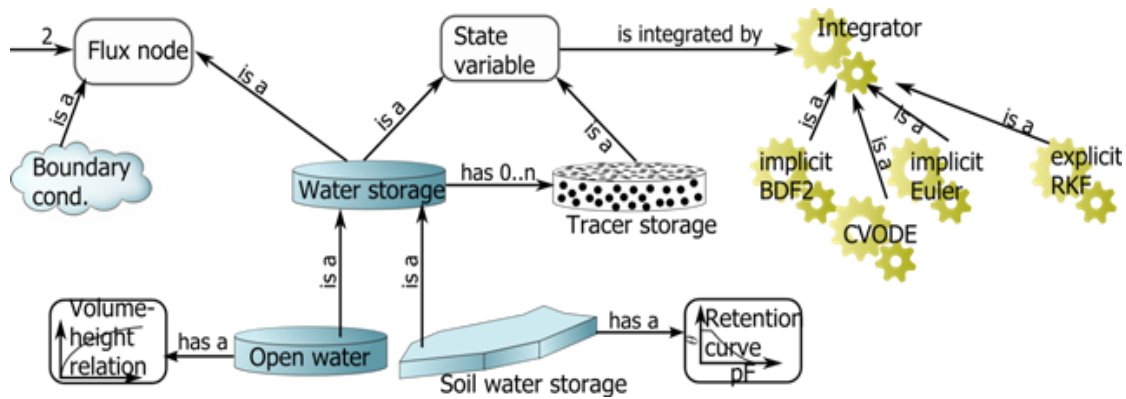


Figure 7 : Abstraction hiérarchique des réservoirs et des flux (Kraft, 2012).

Avant d'aller plus loin dans la description de CMF, il est important de définir quelques termes utilisés dans CMF et qui reviendront régulièrement dans cette thèse :

Cellule/Maille (cell) : Il s'agit d'un sous-système dans CMF, dont la projection en surface est la maille provenant du découpage spatial. Chaque cellule est définie dans l'espace par les coordonnées de son centre en surface. Elle est ensuite discrétisée verticalement en couches pédologiques et numériques si besoin. Chaque couche représente un réservoir de sol (SoilLayer).

Réservoir de stockage (WaterStorage) : un réservoir correspond à une variable d'état et une fonction permettant de calculer sa dérivée à un temps donné ; elles décrivent son état. Un réservoir de stockage peut être un réservoir du sol ou un réservoir de surface (SurfaceWaterStorage). Ce dernier est directement connecté aux conditions climatiques et est conçu pour représenter la condition à la limite de surface du système. Un réservoir de stockage de surface peut être défini comme étant un « OpenWaterStorage » connecté à la surface d'une cellule ou à un tronçon de fossé ou encore à un petit cours d'eau « Reach » positionné entre deux éléments de paysage.

Réservoir de stockage de soluté (SoluteStorage) : est le réservoir de stockage des solutés qui donne l'information de la concentration du réservoir d'eau correspondant.

Nœud (node) : ce que l'on appelle nœud est une classe de base pour tout ce qui peut être connecté par des flux. Ce peut être un point (de fin de flux, comme un exutoire par exemple), un réservoir de stockage ou une condition aux limites. Il est décrit par ses propriétés spatiales. Un nœud peut être la source (connexion droite) ou la cible (target en C++, est la connexion gauche de la fonction de connexion) d'un flux.

Flux de nœud (flux_node) : est la classe de base de tout ce qui peut être connecté avec des flux au sein de la plateforme. Les flux de nœud peuvent être des réservoirs de stockage, des flux, des sources, ou des puits d'un autre système.

Flux de connexion (flux_connection) : représente le flux qui peut être transféré entre deux nœuds du réseau (réservoir, condition aux limites...), que l'on caractérise comme source ou cible. Tous les processus sont représentés par des flux de connexion (par exemple l'infiltration, un écoulement latéral, l'évapotranspiration, le ruissellement de surface, etc.).

Organisation orientée-objet de CMF

La plateforme hydrologique CMF est organisée suivant des espaces de nommage (en anglais Namespace) permettant de structurer les différents modules et classes. Chaque espace de nommage peut partager des propriétés avec d'autres espaces si les classes qu'il contient ont besoin d'accéder à d'autres classes appartenant à ces autres espaces. Il y a actuellement sept espaces de nommage : Water, Project, River, Math, Upslope, Atmospheric et Geometry (*Figure 8*). Chaque espace contient plusieurs classes écrites en C++. Les espaces Water, River et Upslope contiennent les différentes fonctions décrivant les flux de connexion en surface et en subsurface. L'espace Atmospheric dispose des fonctions permettant de lire, de calculer et de connecter les données climatiques au domaine d'étude. Les espaces Project et Geometry contiennent les fonctions nécessaires pour la conception d'un projet de modélisation hydrologique, les classes abstraites des réservoirs de stockage de l'eau, des solutés, des nœuds et des conditions aux limites ainsi que des fonctions pour la prise en compte des stations météorologiques. Enfin, l'espace Math contient tous les solveurs, les variables d'état et des classes concernant le temps.

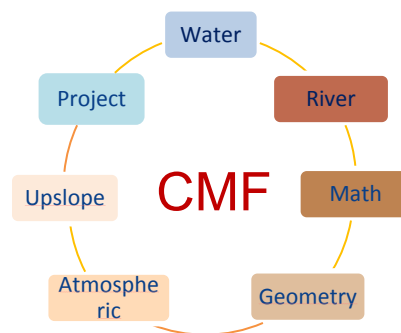


Figure 8 : Structure de CMF.

Chaque classe contient des fonctions membres, des variables, et parfois un constructeur et un destructeur. Ainsi, le développement d'un nouveau module ou d'une nouvelle classe au sein de CMF doit forcément être inclus dans un espace de nommage. En fonction de l'organisation préexistante, une nouvelle classe peut hériter d'une classe existante ou de plusieurs classes abstraites, en respectant la contrainte d'inclure les espaces de nommage des classes pour lesquelles elle doit accéder à un nœud ou au résultat du calcul du pas de temps précédent.

La Figure 9 présente l'UML¹⁰ de base de la plateforme CMF. Elle est conçue en quatre parties. La partie gauche (en vert) représente les éléments permettant de définir le réseau des flux d'eau (décrit par les nœuds et les flux de connexion). Les parties supérieures droites (en rouge et en bleu) représentent les catégories qui permettent de créer le système d'équations et de le résoudre par un solveur. La partie en bas à droite (en orange) illustre une partie des classes utilisées pour décrire l'aspect spatial par la prise en compte des descriptions géographiques et topologiques des cellules. Le tout est résolu dans un solveur en donnant l'état de chaque réservoir à chaque pas de temps. Pour créer le modèle « eau + solutés », on crée d'abord les réservoirs d'eau (WaterStorage) puis on crée les réservoirs de solutés (SoluteStorage) qui suivent le cheminement de l'eau.

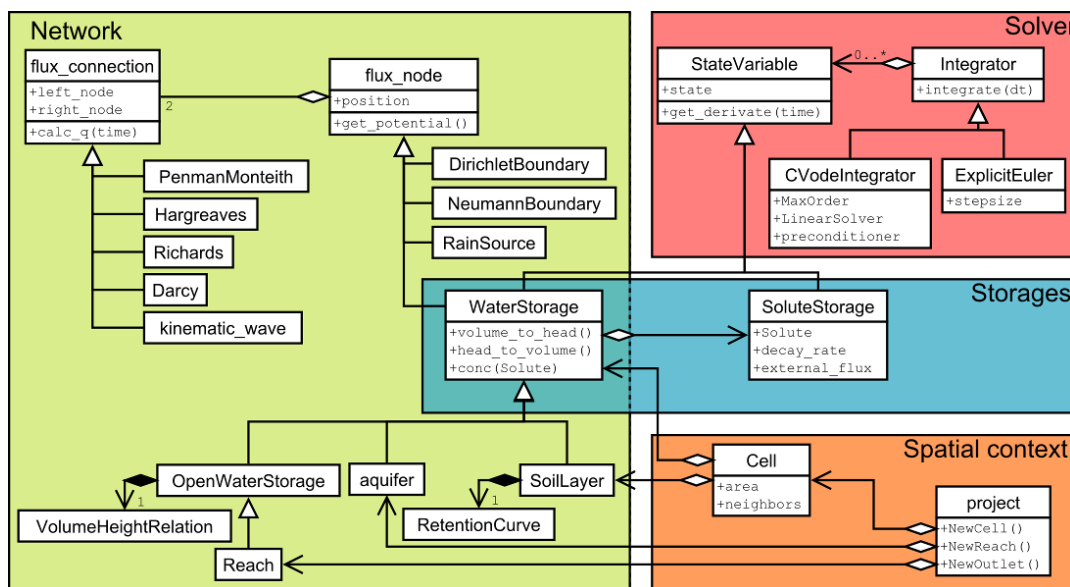


Figure 9 : Schéma simplifié des classes UML de CMF (Kraft et al. 2011).

Résolution numérique avec le solveur CVODE

Comme on le voit dans la Figure 10, l'ensemble des équations est résolu par un solveur. D'un point de vue algorithmique, il n'est pas évident de comprendre intuitivement l'enchaînement des différentes résolutions dans CMF (solveur, échange avec SWIG, ...). Le diagramme de la Figure 10 décrit l'algorithme de fonctionnement de CMF, au niveau de la résolution d'un flux de connexion par CVODE, le solveur qui sera utilisé dans cette thèse. Tous les solveurs, à l'exception du solveur CVODE, sont implémentés en utilisant OpenMP pour le calcul parallèle des produits dérivés, alors que le code CVODE est intégré dans CMF comme une bibliothèque statique. CVODE est un solveur pour les systèmes d'équations différentielles ordinaires (EDO) et est basé sur la formule numérique « Implicit Backward », ce qui est recommandé pour

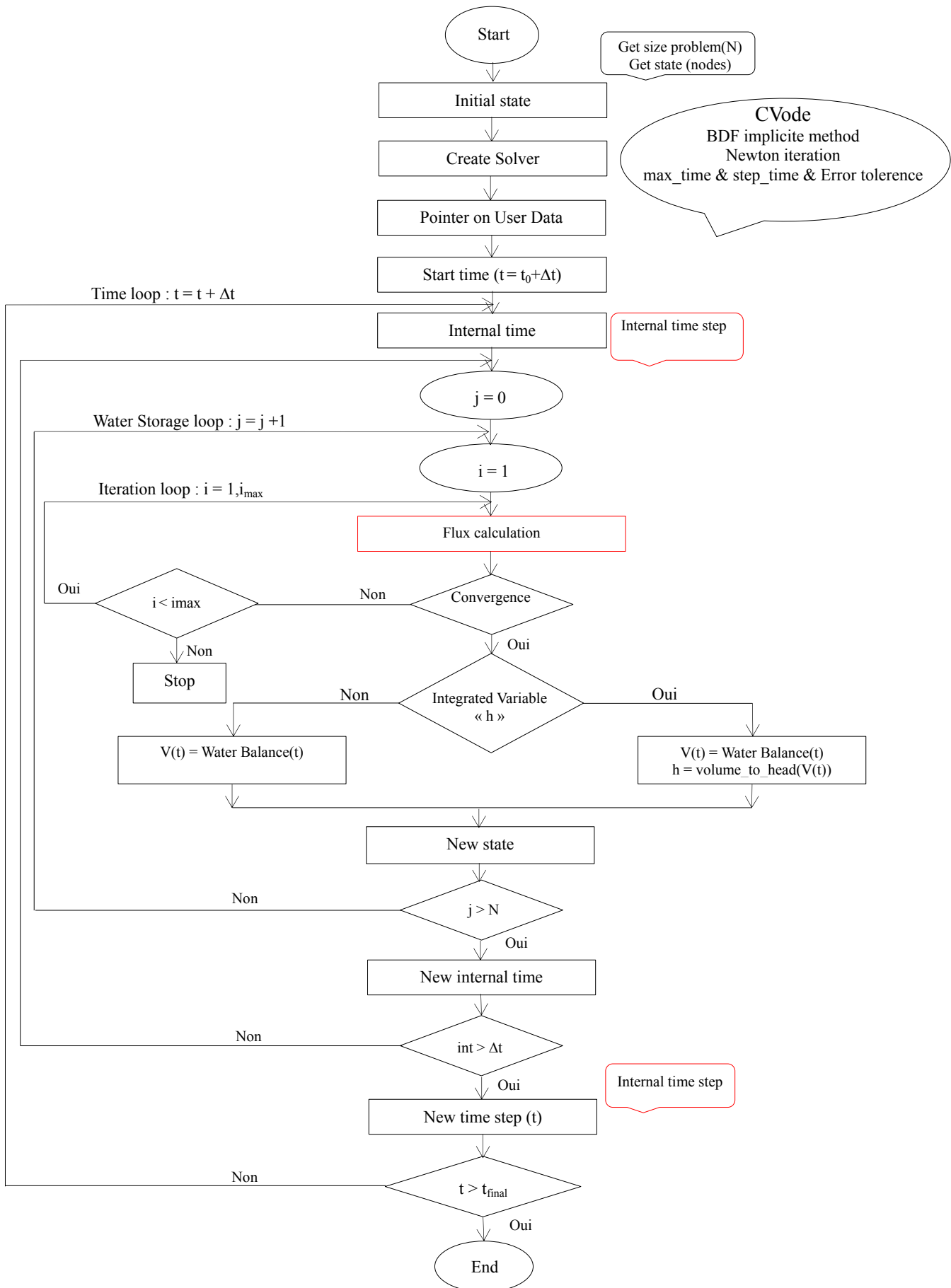
¹⁰ Unified Modeling Language (UML), ou appelé « langage de modélisation unifié », est un langage de modélisation qui adopte l'approche « objet » pour modéliser la structure ou le comportement d'un système, indépendamment de sa méthode ou du langage utilisé.

les problèmes raides. A chaque pas de temps, il résout un schéma d'itération implicite de Newton, qui utilise un système à pas de temps adaptatif interne pour résoudre un système jacobien. Si l'on souhaite comprendre plus en détail le fonctionnement interne et complexe du solveur CVODE, on peut se référer à Cohen and Hindmarsh (1996) et Serban and Hindmarsh (2005). Une brève description du solveur CVODE est donnée dans l'annexe (1).

L'algorithme *Figure 10* décrit quant à lui plus schématiquement le fonctionnement : à l'état initial, le solveur récupère l'état de tous les réservoirs de stockage (StateVariable) puis il calcule les flux au pas de temps indiqué par l'utilisateur. Le test de convergence est fait à chaque itération jusqu'à ce que la solution converge. Lorsque la solution ne converge pas, le solveur diminue le pas de temps en cherchant un pas de temps interne optimal, qui peut être diminué à quelques fractions de secondes. Par ailleurs, dans le cas où le changement du front d'humidité est significatif au cours du pas de temps, une nouvelle étape peut intervenir en faisant diminuer progressivement le pas de temps de calcul interne jusqu'à ce que la solution converge.

Remarque sur le pas de temps pour l'utilisateur : pour améliorer les chances de convergence du modèle CMF, il est recommandé d'utiliser un pas de temps plus petit que la résolution temporelle des données de forçage. Dans le cas contraire, le solveur risque de mal estimer l'évolution des flux lors d'un nouveau pas de temps interne. Le choix d'un nouveau pas de temps interne se fait à l'intérieur du solveur et l'utilisateur ne peut d'aucune façon intervenir dans ce calcul. Cette non-maitrise du pas de temps dans CMF est contraignante du point de vue du calcul des flux de connexion car la plateforme se base sur des instances de contrôle qui permettent de déclencher les processus dans certaines conditions. Ceci ne se fait donc pas d'une manière linéaire mais plutôt en se basant sur des tests de remplissage et de vidange des réservoirs de stockage. Le développement de nouveaux processus en est compliqué, car ce développement demande alors d'implanter des instances spécifiques pour que la représentation des mécanismes s'enchaîne comme on le souhaite. De nombreux tests seront nécessaires pour vérifier les fonctions des réservoirs de stockage ainsi que la séquence de la mise en œuvre des fonctions calculant les flux, même si cela est fait au même pas de temps.

Figure 10 : Algorithme de résolution d'un flux de connexion dans CMF.



Volumes finis pour le transport de l'eau dans CMF

Le transport de l'eau est régi dans la plateforme par l'équation de conservation de la masse. Chaque réservoir maintient un bilan hydrique dont son état hydrique est donné sous forme du volume d'eau. Le taux de changement du volume est la somme des flux entrants et sortants dans le volume. Pour chaque réservoir de stockage i , le bilan d'eau est donné par l'équation suivante :

$$\frac{dV}{dt} = \sum_{j=1}^N (-q_{i,j}(V_i, V_j, t)) \quad (I.2)$$

Où, V est le volume d'eau stocké dans le réservoir de stockage « i », N est le nombre de réservoirs de stockage connectés au nœud « i », $q_{i,j}$ est le flux du réservoir « i » vers le réservoir « j ». Plusieurs méthodes numériques ont été testées dans CMF, y compris des méthodes implicites et explicites. Bien que les méthodes de calcul explicites comme le schéma d'Euler explicite et Runge-Kutta-Fehlberg (RKF) soient peu coûteuses par pas de temps, nombre de configurations possibles dans CMF sont trop instables, ou trop rigides, pour être résolues par une méthode explicite. La méthode implicite a donc été préférée, ce qui a mené au développement de schémas implicites tel que Euler implicite, BDF2 (Backward Differentiation Formula d'ordre 2) et CVODE (solves initial Value problems for Ordinary Differential Equation systems). Il faut noter qu'on parle d'un système d'équations raides quand on a la présence simultanée de phénomènes physiques rapides et d'autres plus lents. C'est le cas par exemple de la résolution de l'équation de l'onde cinématique après qu'il y ait eu infiltration. Ceci pose un vrai problème dans la stabilité de la plupart des méthodes numériques (Gélébart et al., 2010) et conduit souvent à adopter des pas de temps différents pour la résolution des équations relatives aux différents processus. Cependant, la résolution dans CMF se fait au même pas de temps pour tous les flux et la différence des temps caractéristiques des différents processus est régie par des instances de contrôle. Ceci s'avère intéressant mais on verra que cela pourra parfois engendrer des difficultés pour les développeurs dans le cas où ils ont besoin de décrire séquentiellement les processus.

La méthode de résolution la plus testée et la plus recommandée dans CMF est celle proposée par le solveur aux volumes finis CVODE, qui représente une bonne solution pour les systèmes raides et non-raides. Le solveur adopte un schéma implicite à cinq pas de temps et se caractérise par sa stabilité à la deuxième itération. Enfin, dans le cas de la modélisation du transport de solutés, un réservoir de type « SoluteStorage » est associé à chaque réservoir d'eau. Le transport est régi par une équation de convection, dont on revient sur la description du transport de substance au sein de la plateforme CMF dans le 4^{ème} chapitre.

Interface d'utilisation de CMF

La plateforme CMF ne contient pas d'interface graphique. Son utilisation se fait uniquement à travers des scripts en Python pour construire un modèle hydrologique au sein de la plateforme. En effet, les scripts en Python représentent un moyen performant pour l'utilisateur pour construire son propre projet et manipuler les différentes connexions de flux advenant dans et entre les éléments du paysage d'une manière libre et plus ou moins simple (Ousterhout, 1998). Le choix du langage Python est basé : sur son utilisation par plusieurs

disciplines, sur les nombreuses bibliothèques développées en libre accès qui permettent l'accès et la visualisation des données, ainsi que sur la simplicité de l'écriture de codes d'extension avec d'autres langages et outils informatique tels que C++, Fortran, etc., ainsi que les systèmes d'information géographique (SIG). CMF utilise plusieurs bibliothèques Python telles que *math* et *NumPy*, qui aident dans le calcul mathématique et la gestion du temps, ainsi que la bibliothèque *Matplotlib* pour la visualisation des résultats. En revanche, si on veut développer de nouveaux modules, il faut les programmer en C++ et recompiler l'ensemble à l'aide d'un compilateur C++ (Microsoft Visual Studio, Windows SDK for Windows Server 2008 etc ...). Le Simplified Wrapper and Interface Generator (SWIG) assure les échanges entre le code Python et le code C++ (Kraft *et al.*, 2010). Le numéro d'une nouvelle version de CMF est généré depuis la branche SVN. Ce dernier est l'environnement dans lequel travaillent beaucoup de collaborateurs et de développeurs de CMF, dont chaque commit génère un nouveau numéro sans forcément générer une nouvelle version compilée de CMF.

I.3.2. Fonctions de flux utilisées dans le cadre de cette thèse

Une fois définies de manière conceptuelle les différents types de réservoirs et les conditions aux limites, il faut encore définir les flux de connexions pour que le modèle soit effectivement complet. Il existe déjà une grande quantité de fonctions de flux prédéfinies dans CMF. Sont présentées ci-dessous celles utilisées dans le cadre de ma thèse pour la modélisation hydrologique menée au sein de la plateforme (*Figure 11*). Certaines n'ayant pas été suffisamment testées, des problèmes ont pu être mis en lumière dans ces fonctions comme on le verra dans le chapitre II. Enfin, certaines n'existaient pas préalablement et ont ainsi été développées par moi-même (chapitre III). Compte tenu de notre objectif, qui est de représenter à un degré de complexité raisonnable le transfert des pesticides au sein d'éléments du paysage sur un versant en surface et en subsurface, on a choisi d'utiliser pour décrire le transport de l'eau :

- L'équation de l'onde cinématique pour la simulation du ruissellement de surface ;
- La loi de Richards 1D pour l'infiltration verticale ;
- La loi de Darcy pour la modélisation des écoulements latéraux saturés ;
- Des fonctions représentant le ruissellement et les écoulements subsurfaciques en bas de versant pour représenter la connexion avec le cours d'eau ;
- Les échanges de la nappe avec la rivière, régis par la loi de Darcy.

Le ruissellement de surface

La plateforme CMF dispose de plusieurs fonctions décrivant le ruissellement de surface et les écoulements dans les cours d'eau en se basant sur la loi de Manning, définie par :

$$q_{Manning} = Ad^{\frac{2}{3}} \sqrt{\frac{s}{n}} \quad (I.3)$$

Où, $q_{Manning}$ [L^3/T] est le débit ruisselé ; d [L] est la hauteur du ruissellement et correspond aussi au rayon hydraulique (R_h) pour les canaux (aire divisée par le périmètre de la section) ; A [L^2] est la section

transversale de la surface de l'écoulement ; s [LL^{-1}] est la pente de la surface de l'écoulement ($s = \frac{z_1 - z_2}{l}$) où z_1 et z_2 sont les altitudes des mailles (1) et (2) ; l [L] est la distance entre le centre des deux cellules et n [$TL^{-1/3}$] est le coefficient de Manning.

Les deux fonctions les plus testées et les plus recommandées par le concepteur de CMF sont *Manning_Kinematic* et *Manning_Diffusive*. La fonction *Manning_Kinematic* prend en compte le gradient topographique entre les deux mailles adjacentes, tandis que *Manning_Diffusive* prend en compte la différence de la hauteur d'eau. Nous avons pu constater que cette dernière n'est pas stable numériquement pour des lames d'eau importantes avec un petit gradient topographique, on utilisera donc *Manning_Kinematic*.

L'infiltration à la surface

L'équation de Richards est développée dans CMF pour représenter l'infiltration verticale. Il existe deux versions différentes : *MatrixInfiltration* pour l'infiltration de l'eau de surface dans la première couche du sol, qui prend en compte la différence entre la lame d'eau en surface et le potentiel de la première couche du sol, et *Richards* pour les autres couches de sol qui prend en compte le gradient de charge hydraulique entre les deux couches du sol. *MatrixInfiltration* permet de connecter le réservoir de stockage de surface contenant la pluie et le ruissellement entrant (SurfaceWaterStorage) avec la première couche de surface. Le gradient est estimé entre la cellule de surface et le centre de la première couche, comme suit :

$$q_{\max} = \frac{\Psi_{\text{surface}} - \Psi_{\text{soil}}}{\Delta z} K A_{\text{cell}} \quad (\text{I.4})$$

Où, Ψ_{soil} [L] est le potentiel matriciel du sol ; Ψ_{surface} [L] est la hauteur d'eau dans le réservoir de surface ; A_{cell} [L^2] est la surface de la cellule de surface ou ce que l'on appelle l'unité de réponse hydrologique ; Δz [L] est la distance entre le centre de la cellule de surface et la première couche (la moitié de l'épaisseur de la première couche) ; K [LT^{-1}] est la moyenne géométrique de la conductivité à saturation de la surface et la conductivité de la première couche au degré d'humidité actuel, définit comme suit :

$$K = \sqrt{K(\theta_{\text{layer}})K_{\text{sat}}} \quad (\text{I.5})$$

Où, $K(\theta_{\text{layer}})$ [LT^{-1}] est la conductivité actuelle de la couche de surface ; K_{sat} [LT^{-1}] est la conductivité à saturation de la couche de surface. On verra par la suite que le choix d'une moyenne géométrique peut poser des problèmes de discontinuité avec le reste des couches du sol.

Infiltration entre les autres couches du sol

L'infiltration entre les différentes couches du sol est généralement résolue par l'équation de Richards pour les écoulements dans la zone non-saturée. Elle est donnée comme suit :

$$q_{\text{Richards}} = \frac{\Delta \Psi_{\text{tot}}}{d} K(\theta_{i,j}) A \quad (\text{I.6})$$

Où, Ψ_{tot} [L] est la différence entre le potentiel total d'eau des deux couches du sol (1) et (2) ; d [L] est la

distance entre le milieu des deux couches du sol, qu'elles soient numériques ou pédologiques ; $K(\theta_{i,j})[LT^{-1}]$ est la moyenne géométrique de la conductivité hydraulique entre les deux couches (i) et (j) ($K(\theta_{i,j}) = \sqrt{K(\theta_i)K(\theta_j)}$) où, $\theta [L^3L^{-3}]$ la teneur en eau de la couche ; $A[L^2]$ la surface de la section transversale du flux.

Les écoulements latéraux

CMF propose quatre fonctions différentes pour la description des écoulements latéraux en subsurface. Les différentes fonctions se basent sur l'équation de Darcy ou l'équation de Richards selon que l'on considère les écoulements latéraux dans la zone saturée ou les écoulements variablement saturés. En outre, le principe de connexion dans CMF et que les fonctions sont appliquées sur tout le profil de chaque maille et qui rend une valeur zéro si la zone est non-saturée.

1) Richards_lateral

La fonction *Richards_lateral* permet la simulation des flux latéraux subsurfaciques en fonction du potentiel réel, comme suit :

$$q_{Richards_lat(i,j)n} = \frac{\Psi_{in} - \Psi_{jn}}{l} K(\theta_{in,jn})A \quad (I.7)$$

Où, $q_{Richards_lat(i,j)n} [L^3/T]$ est le flux latéral estimé avec la formule de Richards entre les deux éléments i et j pour la couche n ; $\Psi_{in} [L]$ est le potentiel total (ou charge hydraulique) du nœud correspondant à la couche « n » de l'élément i ; $l [L]$ est la distance entre les centres des deux éléments ; $K(\theta_{in,jn})[LT^{-1}]$ est la moyenne géométrique de la conductivité hydraulique de la couche n entre les deux éléments i et j ; $A [L^2]$ est la surface de la section transversale de l'interface de la couche n entre les deux éléments (i) et (j).

2) Darcy_Kinematic

Cette fonction est équivalente à la précédente, mais ici, le gradient hydraulique est assimilé au gradient topographique et seule la conductivité de la couche amont est considérée, comme suit :

$$q_{Darcy} = \frac{\Delta z_{surface}}{l} K(\theta_i)_{source}A \quad (1.8)$$

Où, $q_{Darcy} [L^3T^{-1}]$ est le débit du flux dans la zone saturée ; $\Delta z_{surface} [L]$ est la différence entre la hauteur des deux cellules de surface correspondantes (le gradient hydraulique est assimilé au gradient topographique) ; $l [L]$ est la distance latérale entre le centre de deux couches adjacentes ; $K(\theta_i)_{source} [LT^{-1}]$ est la conductivité hydraulique de la couche (i) du nœud amont, considéré comme source de l'écoulement ; $A [L^2]$ est la surface de la section transversale.

3) Darcy

Ici seuls les écoulements saturés sont pris en compte : l'estimation du flux latéral est calculée en fonction du gradient réel et en considérant une transmissivité saturée, comme suit :

$$q_{Darcy_lat} = \frac{\psi_i - \psi_j (T_i + T_j)w}{l \cdot 2} \quad (I.9)$$

Où, q_{Darcy_lat} [L^3T^{-1}] est le flux entre les couches horizontales adjacentes du sol ; T [L^2T^{-1}] est la transmissivité ($T_i = K_{sat} \cdot \text{épaisseur de la couche saturée}(i)$) ; w [L] est la largeur de la frontière d'échange entre les couches.

4) TopographicGradientDarcy

Le flux latéral est calculé en fonction du gradient topographique et une transmissivité saturée, comme suit :

$$q_{lat} = \frac{\Delta z_{surface} (T_i + T_j)w}{l \cdot 2} \quad (I.10)$$

Où, d [L] est la distance verticale entre les centre des deux couches i et j , et les autres variables sont les mêmes que dans la fonction « Darcy ».

Rétention dans le sol

La plateforme CMF contient trois fonctions pour l'estimation de la courbe de rétention : *BrooksCoreyRetentionCurve*, *VanGenuchtenMualem* et une fonction de rétention linéaire *LinearRetention*. Le modèle de van Genuchten (1980) a été choisi dans CMF pour décrire la rétention de l'eau dans le sol. Ce choix est basé sur notre volonté d'avoir une représentation physique de l'évolution du front d'humectation en gardant notre philosophie de développer une modélisation simplifiée. Ce modèle présente une courbe de rétention continue au contraire du modèle de Brooks and Corey (1964) qui présente des discontinuités dans le cas des valeurs de pression négatives. Il est décrit par l'équation :

$$W(\Psi) = (1 + (\alpha\Psi)^n)^{-m} \quad (I.11)$$

Où, $W(\theta) = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$ est le degré de saturation [L^3L^{-3}], θ_r [L^3L^{-3}] est la teneur en eau résiduelle et θ_s [L^3/L^3] est la teneur en eau à saturation ; n est le coefficient de van Genuchten ($m = 1 - 1/n$) ; Ψ [L] est le potentiel matriciel ; α [cm^{-1}] l'inverse de la pression d'entrée d'air, h_g . Le paramètre h_g peut aussi être considéré comme un paramètre de normalisation du potentiel matriciel.

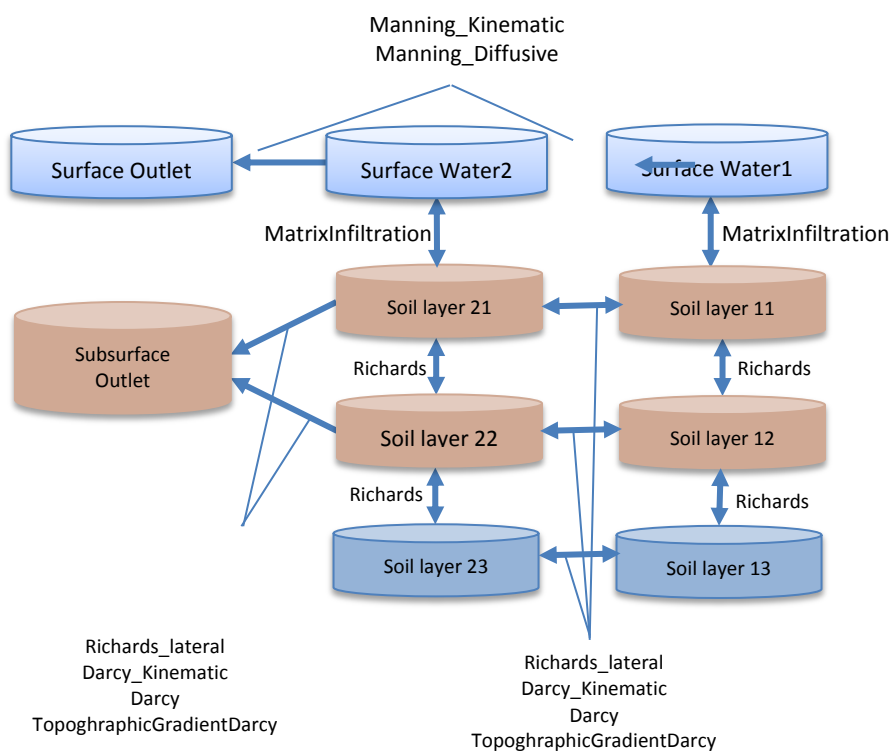


Figure 11 : Schéma du modèle dans CMF avec les fonctions existantes pour représenter le transfert hydrique à l'échelle d'un versant.

I.3.3. En pratique : comment développer un modèle hydrologique avec CMF ?

La construction d'un modèle avec CMF passe par plusieurs étapes : une fois que l'on a décidé de la conceptualisation à adopter pour les réservoirs et les flux de connexion, en fonction des éléments du paysage et des processus que l'on veut représenter, l'étape suivante est d'implémenter concrètement ces choix en construisant le modèle. Cette partie va montrer en pratique comment construire un modèle à l'échelle du versant, qui est celui utilisé dans la suite de cette thèse. Pour construire le modèle avec CMF, on procède en 3 étapes principales :

1. Discrétisation du versant horizontalement en cellules ;
2. Discrétisation de chaque cellule verticalement en couches ;
3. Connexion des réservoirs de stockage avec des flux de connexions.

Le découpage horizontal du versant en surface

Les choix de développement et de structure de CMF permettent de représenter des versants ou des bassins versants avec une grande flexibilité de description des éléments. On peut choisir directement le nombre de mailles, ou adopter le découpage à l'aide d'un fichier raster, pour lequel Python contient des bibliothèques avec des fichiers SIG. La connexion topologique est faite soit à travers le fichier SIG, soit à l'aide des lignes de commande.

Le versant est discrétisé à la surface en mailles (surface des cellules), dont la forme et la taille n'a pas d'importance en théorie : on peut avoir des cellules carrées, triangulaires ...etc. En pratique, l'obtention de mailles de tailles homogènes ou proches est un paramètre à prendre en compte (Kraft, 2012) pour la stabilité numérique du modèle. Selon les schémas de discrétisation, l'échelle et l'approche adoptée, on adaptera le type de maillage. Dans notre problématique de modélisation à base physique-spatialisée (voir la partie I.1.2.), il est conseillé d'utiliser des mailles calculées en pre-processing pour décrire les cellules. Cependant, on verra par la suite que le raffinement des cellules sera nécessaire pour parvenir à des écoulements raisonnables entre les cellules. Chaque cellule est caractérisée par les coordonnées de son centre et la largeur de l'écoulement. La topologie peut être définie en se basant sur le MNT et des librairies Python ou spécifiée manuellement en identifiant le voisinage entre les cellules dans le cas d'un versant virtuel par exemple. Pour un bassin versant, CMF permet de la calculer de façon automatique. Les surfaces des cellules représentent les nœuds des flux, où toute l'eau entrante (provenant des données météorologiques dont la pluie, la neige et l'évapotranspiration) est acheminée à travers les réservoirs d'eau du sol à l'aide des flux de connexion.

L'exemple suivant présente une manière simple pour définir un projet dans Python, dont le versant contient 3 mailles :

```
# Create a project
p=cmf.project()
cellcount = 3    # numbers of cells
celllength = 50 # length of cells
# Create a cells at position x
for i in range(cellcount) :
    c = p.NewCell(x[i], 0, cellheigh[i], celllength*x[i])
# Make cell topology
for i,c in enumerate(p[:-1]):
    c.topology.AddNeighbor(p[i+1], celllength)
```

La discrétisation verticale des mailles

Chaque colonne du sol est divisée verticalement en plusieurs couches pédologiques qui seront si nécessaire discrétisées en couches numériques de même ou d'épaisseurs différentes. Il est tout de même conseillé de rester raisonnable sur le raffinement des couches pour éviter des temps de calcul trop longs, et sur l'irrégularité des épaisseurs pour les instabilités numériques. Chaque couche pédologique ou numérique constitue également un réservoir de sol (SoilLayer) et est caractérisée par une courbe de rétention en eau et une courbe de conductivité, en fonction de la pression capillaire. L'exemple suivant illustre un cas où on définit 10 couches de 10 cm d'épaisseur, caractérisées par les mêmes paramètres hydrodynamiques :

```

for c in p:
  for i in range(10):
    r_curve = cmf.VanGenuchtenMualem(Ksat=1, alpha=0.01, n=1.5, phi=0.4)
    depth = (i+1) * 0.1

    cell.add_layer(depth, r_curve)

```

Connexion entre les réservoirs et conditions limites

Une fois que la topologie est déterminée dans le modèle hydrologique au sein de la plateforme CMF, il reste à définir les connexions entre les réservoirs, c'est-à-dire en vertical et en latéral ainsi que la définition des conditions initiales et aux limites.

Je présente un exemple de la définition des connexions :

```

# Infiltration flux
c.install_connexion(cmf.MatrixInfiltration)
c.install_connexion(cmf.Richards)
# Lateral flux
cmf.connect_cells_with_flux(p,cmf.Richards_lateral)
# Surface flux
cmf.connect_cells_with_flux(p,cmf.KinematicSurfaceRunoff)

```

La définition d'une condition à la limite de Dirichlet (en charge) peut par exemple être réalisée en spécifiant un réservoir de stockage d'eau comme étant un « Outlet ». Cette condition est utilisée en bas de versant ou en bas d'un profil 1D de sol, où la charge prescrite est affectée à la base du profil :

```

# Set the outlet
outlet = p.NewOutlet('name',position=position)
# Set the outlet 0,5 m above the outlet height
outlet.potential = outlet.position.z + 0.5

```

La définition d'une condition à la limite de Neumann (de flux) permet de définir le flux s'appliquant sur un réservoir :

```
# Create a Neumann Boundary condition connected to W1
In = cmf.NeumannBoundary.create(W1)

# Create a timeseries with daily alternating values.
In.flux = cmf.timeseries(begin = datetime.datetime(2012,1,1),
                        step = datetime.timedelta(days=1),
                        interpolationmethod = 0)

for i in range(10):
# Add 0.0 m3/day for even days, and 1.0 m3/day for odd days
    In.flux.add(i % 2)
```

Conclusion

Pour le développement d'une modélisation hydrologique spatialisée à l'échelle d'un versant, permettant l'étude du transfert des pesticides en surface et en subsurface pour mieux rendre compte des connexions entre les unités hydrologiques, une étude bibliographique importante sur les outils de modélisation a été faite, plus spécifiquement sur les plateformes hydrologiques qui nous paraît un outil performant et conviviale pour le développement de la modélisation hydrologique.

Le choix d'une approche orientée-processus permet à la fois de coupler les processus hydrologiques advenant dans et entre les éléments du paysage en choisissant le degré de complexité adapté aux objectifs visés pour les transferts en surface et en subsurface, nous a menés vers le choix du modèle Catchment Modelling Framework. Travailler avec une plateforme Open-source est par ailleurs très intéressante pour nous, et pourrait déboucher sur une collaboration à long terme avec l'équipe de l'université de Giessen. En revanche, la plateforme ne possède pas de beaucoup de documentation ni d'un tutoriel sauf le wiki qui s'alimente au fur et à mesure des besoins des utilisateurs et des développeurs.

CMF est une plateforme récente qui a été validée dans le cadre de quelques projets ainsi que la thèse de Philipp Kraft. Cependant, il nous paraît très important de la tester sur des cas de versants simples en variant quelques paramètres pour mieux comprendre le fonctionnement et cerner les conséquences des choix concernant les fonctions utilisées, le découpage, les connexions, etc.... Ces tests de la réponse hydrologique de la plateforme CMF seront menés en plusieurs étapes, et feront l'objet du prochain chapitre. C'est seulement à la suite de ces tests nécessaires de validation d'un modèle de versant sous CMF, avec les fonctions de flux de connexions utilisées, que nous commencerons le développement de nouvelles fonctions pour représenter les processus supplémentaires : double perméabilité.

Nous avons choisi de négliger l'évapotranspiration dans le reste du travail de cette thèse. La priorité a en effet été donnée à la représentation des processus du transport d'eau sur des tests plus ou moins simplifiés et à la validation de la réponse hydrologique dans CMF, sur des cas simples dans un premier temps.

Chapitre II : Scénarios tests de la plateforme hydrologique CMF

Chapitre II : Scénarios tests de la plateforme hydrologique CMF

Introduction

La plateforme de modélisation CMF est récente et elle n'a pas encore été testée sur beaucoup d'études couplant la surface et la subsurface à l'échelle du versant. La documentation, qui s'enrichit au fur et à mesure sur le wiki de la plateforme, ne fournit que peu de recommandations d'utilisation du point de vue des discrétisations spatiale et temporelle. Les exemples d'application se limitent à l'utilisation de quelques fonctions représentant les processus de transport d'eau et des solutés, la lecture des données météorologiques, la mise en place des conditions initiales et aux limites. L'objectif de ce chapitre est donc d'étudier les points forts et les limites de la plateforme dans notre contexte, d'évaluer les performances des fonctions régissant le transport d'eau en surface et en subsurface ainsi que les caractéristiques du système étudié de point de vue discrétisations spatiale et temporelle, conditions initiales et aux limites utilisées. Ces tests pourront aboutir à proposer si besoin des améliorations à apporter à certaines fonctions ou conceptualisations existantes.

Nous avons donc choisi dans un premier temps de tester CMF sur un cas-test simple d'infiltration en une dimension, afin de faire une première prise en main et de vérifier avec celle-ci si l'on obtient bien un fonctionnement hydrologique du système qui correspond à la compréhension qu'on en a. Les résultats obtenus avec CMF ont été comparés avec des simulations menées avec Hydrus1D (Šimůnek *et al.*, 1998).

En seconde étape, nous avons choisi de caractériser le ruissellement dans CMF en la soumettant à un benchmark à l'échelle d'un versant issu de la littérature (Sulis *et al.*, 2010). Ce choix est justifié d'une part par la nouveauté de CMF et le besoin d'approfondir sa prise en main avant de commencer d'y ajouter des développements, et d'autre part par la nécessité de confronter CMF à une référence déjà validée par la communauté de recherche autre que Hydrus qui ne permet pas de représenter le ruissellement de façon couplée avec la subsurface. Ce benchmark compare les modèles ParFlow (Ashby and Falgout, 1996; Kollet and Maxwell, 2006) et Cathy « CATchment HYdrology » (Bixio *et al.*, 2000; Camporese *et al.*, 2010) sur des versants virtuels, et nous utiliserons uniquement les simulations de Cathy pour valider celles de CMF.

Ce benchmark est axé sur la genèse et le transfert de ruissellement sur un versant virtuel simple et homogène. On attend, cependant, de CMF de modéliser les écoulements de subsurface de façon pertinente dans des conditions réalistes ; nous avons donc poursuivi notre étude en comparant la réponse de CMF à celle d'Hydrus2D (Simunek *et al.*, 1999; Šimůnek *et al.*, 2006b), pour des scénarios d'écoulement de subsurface sur un versant représentatif du site expérimental de la Morcille (Beaujolais viticole, 69), suivi par Irstea depuis une quinzaine d'années. Le choix d'Hydrus2D est basé sur notre volonté de poursuivre ensuite la comparaison et la validation de la modélisation développée avec CMF pour les transferts d'eau et de solutés dans les milieux variablement saturés. En effet, Hydrus2D permet de représenter les solutés, et la double perméabilité, qui font l'objet des chapitres suivants. Cette comparaison est faite en choisissant autant que possible une conceptualisation proche des caractéristiques du système et des conditions aux limites entre les modèles, tout en restant conscient des différences en termes de discrétisation, de résolution numérique, et de couplage des processus. Un récapitulatif des modélisations effectuées dans ce chapitre, en vue de caractériser la réponse de CMF, est donné dans le *Tableau 1*.

Tableau 1 : Récapitulatif des simulations menées dans le chapitre 2.

Partie	Processus visé	Type modélisation	Cas d'étude	Modèle de comparaison
Partie (II.2)	Infiltration	1D	Sol limoneux-sableux	Hydrus1D
Partie (II.3)	Ruissellement	2D - versant	Sol sableux-limoneux Pente (5% et 0,05%)	Cathy
Partie (II.4)	Flux subsurfactive	2D - versant	Sol : limoneux-sableux Sol : sableux Pente 5%	Hydrus2D

II.2. Prise en main de CMF

II.2.1. Contexte

Cette partie est consacrée à la prise en main de la plateforme hydrologique CMF sur un cas simple, de profil de sol unidimensionnel. Nous avons choisi de tester, dans un premier lieu, 2 fonctions d'infiltration existantes (*MatrixInfiltration* et *Richards*) avant de passer à la modélisation des versants plus complexes et de valider d'autres processus physiques. Nous testerons également la sensibilité de CMF par rapport à la discrétisation verticale et son effet sur la réponse hydrologique de la plateforme en comparant avec *Hydrus1D*.

Remarque : les résultats présentés ici correspondent à la version **CMF-0.967**, qui est la dernière version utilisée pour le reste du travail, suites aux corrections de bugs qui ont été découverts grâce à la comparaison de CMF avec le benchmark (section II.3).

II.2.2. Méthodologie et résultats

Ces premiers tests ont pour objectif de prendre en main la plateforme et comprendre les règles à respecter dans la construction d'une modélisation hydrologique au sein de la plateforme. Il s'agit aussi de maîtriser la définition de quelques conditions aux limites, telles celles utilisées dans ce scénario où on considère un drainage libre en bas du profil, en comparant avec le modèle *Hydrus 1D*.

Le profil de sol correspond à un sol limoneux-sableux de 1 m de profondeur, représenté par un jeu de paramètre proche de celui utilisé dans la comparaison avec le benchmark dans la partie suivante. Ses caractéristiques hydrodynamiques de van Genuchten sont (catalogue *Hydrus2D*, Zhang et van Genuchten, 1994) : $K_{\text{sat}} = 41,66 \text{ mm/h}$, $n = 1,5$, $\alpha = 0,01 \text{ cm}^{-1}$, $\theta_s = 0,4 \text{ mm}^3/\text{mm}^3$, $\theta_r = 0,01 \text{ mm}^3/\text{mm}^3$. On considère un flux de 20,8 mm/h à partir du début de la simulation et pendant 2,4 heures (0,1 jour). Nous avons testé différentes discrétisations verticales dans CMF (représentées par les couches numériques des cellules), de 1 cm, 5 cm et 10 cm. Par ailleurs, des couches numériques de 5 mm d'épaisseur ont été considérées dans *Hydrus 1D*. La simulation a été menée pour une période de 0,6 j avec un pas de temps de 1 minute dans CMF ainsi que dans *Hydrus1D*. Les conditions initiales sont données pour une pression nulle définie en bas de profil du sol en considérant un équilibre hydrostatique au-dessus. Une condition limite de drainage libre a été définie en bas de profil dans les deux modèles. Ainsi, un réservoir de type « Outlet » a été considéré comme exutoire en bas du profil dans CMF récupérant toute l'eau qui est acheminée vers le bas du profil. La fonction d'infiltration utilisée dans cet exemple est *MatrixInfiltration* pour l'infiltration en surface et *Richards* pour la percolation.

La *Figure 12* représente la percolation à la surface du profil du sol qui est de l'ordre de 480 mm/j : lorsque le profil du sol est sec, CMF infiltre la majorité de l'eau qui existe en surface ; cette réponse est due à la modification que j'ai apportée à la fonction d'infiltration en surface *MatrixInfiltration* en remplaçant la moyenne géométrique des conductivités hydrauliques par la conductivité hydraulique à saturation dans la

version **CMF-0.967** (voir la section III.3.5). Une accumulation de l'eau infiltrée est observée dans le bas du profil au-dessus de la nappe. Les deux graphes représentant le potentiel matriciel et la saturation au fil du temps montrent qu'à l'état initial, la plateforme vérifie bien l'état d'équilibre hydrostatique.

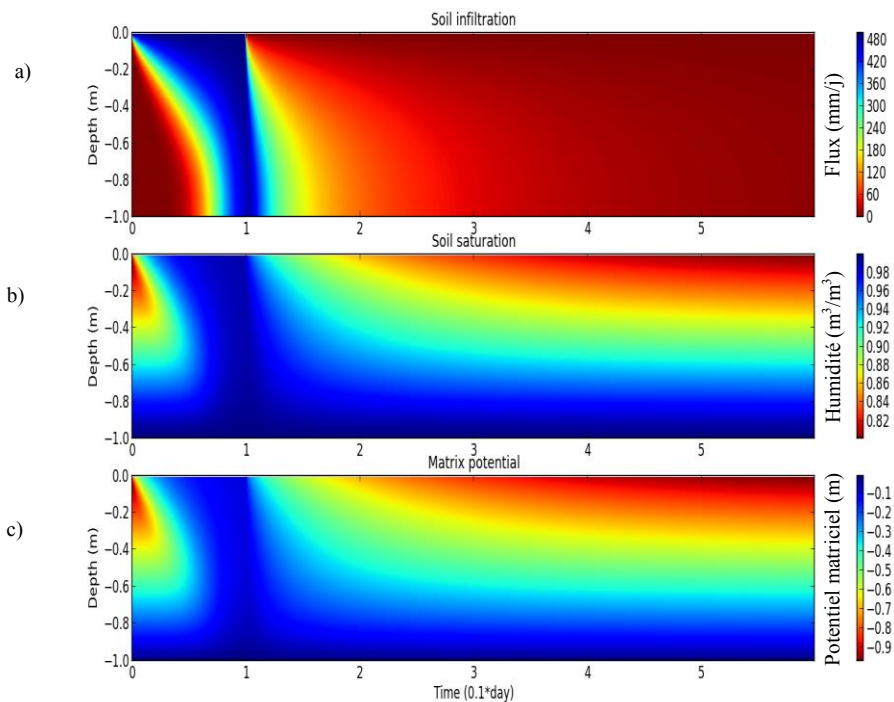


Figure 12 : Profil de sol limoneux-sableux avec un flux constant 20,8 mm/h en surface et un drainage libre en bas de profil ($\Delta z = 1\text{cm}$) a) Percolation (mm/j) b) Degré de saturation (m^3/m^3) et c) Potentiel matriciel (m) en fonction de la profondeur.

La Figure 13 représente le flux en bas du profil dans Hydrus1D et CMF pour chaque discrétisation prise en compte. On remarque que les flux en bas du profil sont comparables dans CMF et Hydrus1D dans le cas de la discrétisation à 1cm avec un léger retard dans l'arrivée du pic du flux en bas du profil. Par ailleurs, une légère sous-estimation de CMF par rapport à Hydrus est observée dans le cas des discrétisations grossières : cette sous-estimation croît avec la résolution numérique de CMF. Ceci est expliqué par la sous-estimation de l'infiltration en surface surtout dans le cas de la discrétisation grossière au début de la simulation (voir Figure 14). L'infiltration est similaire à celle produit dans Hydrus1D dans le cas de la discrétisation fine, qui est pourtant bien plus grossière que celle de Hydrus. Par ailleurs, la sous-estimation du flux infiltré en surface dans le cas de la discrétisation grossière est peut être due à la résolution numérique aux volumes finis adoptée dans CMF : plus l'épaisseur de couche est grossière plus la moyenne géométrique des conductivités adoptées pour l'infiltration dans le profil du sol influence l'infiltration en surface. On remarque, qu'à partir du deuxième pas de temps de simulation (2 min), l'infiltration en surface dans CMF pour la discrétisation grossière s'améliore.

La *Figure 15* montre que les profils d'humidité sont similaires dans les deux modèles, suivant une discrétisation à 1 cm, à $t = 0$ j et à la fin de la simulation ($t = 0,6$ j). Par ailleurs, un petit décalage est remarqué dans le front d'humectation dans CMF lors de l'application de la condition de flux en surface ($t = 0,06$ j). A la fin de l'application de la condition limite de flux en surface, le profil du sol est légèrement plus saturé que celui simulé avec Hydrus1D.

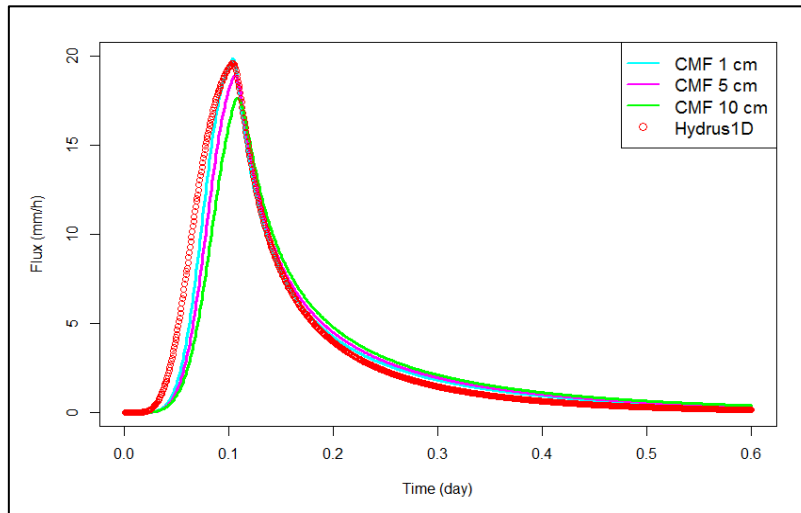


Figure 13 : Flux (mm/h) percolant en bas du profil du sol limoneux-sableux dans CMF et Hydrus1D.

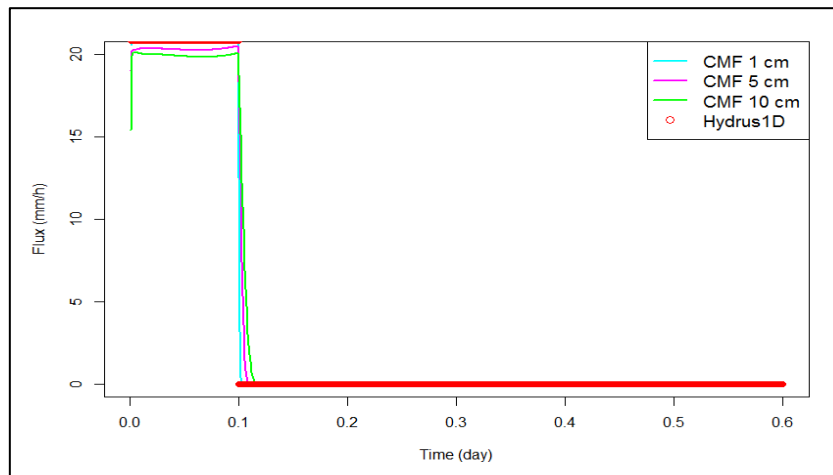


Figure 14 : Flux (mm/h) infiltré en surface du profil du sol limoneux-sableux.

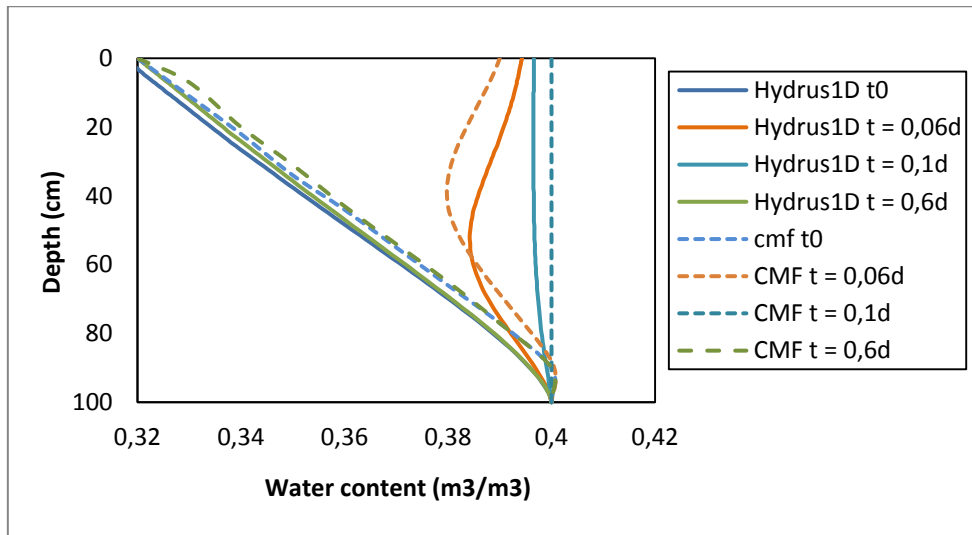


Figure 15 : Profils d'humidité du sol limoneux-sableux dans CMF et Hydrus1D ($\Delta z = 1\text{cm}$).

Les erreurs sur les bilans d'eau sont présentées dans le *Tableau 2* et elles sont définies comme suit :

$$BME = \frac{(S_I+P)-(V_{\text{sortie}}+S_F)}{S_I+P} * 100$$

Où, S_I [L^3] est le stock initial en eau ; S_F [L^3] est le stock final en eau; P [L^3] est la pluie et V_{sortie} [L^3] est le volume récupéré en bas du profil.

On constate que le bilan est correct dans CMF et que l'erreur est faible malgré le fait qu'elle reste plus importante par rapport à Hydrus1D qui est de 0,002% (*Tableau 2*).

Tableau 2 : Bilans d'eau des simulations CMF

CMF	Discrétisations		
	cm	dz 5 cm	dz 10 cm
Erreurs	0,09 %	0,1 %	0,12 %

II.2.4. Conclusion

Cette première partie a permis une première prise en main de CMF. La confrontation des résultats obtenus dans CMF à Hydrus1D ont montré que la réponse de CMF est bonne en termes d'infiltration, sur le flux en bas de profil, la teneur en eau, et le flux infiltré en surface. Les différences entre les deux modèles proviennent essentiellement de la résolution numérique. Cependant on peut considérer qu'avec une discrétisation suffisamment fine, CMF se comporte de façon très similaire à Hydrus1D pour cet exemple basique d'infiltration, malgré son aspect plus modulaire. Enfin, les résultats ont montré que CMF est fortement sensible à la discrétisation verticale surtout par rapport à l'infiltration en surface (*MatrixInfiltration*) qui nécessite une discrétisation fine. L'infiltration en subsurface en adoptant la fonction *Richards* est adaptée pour la simulation de l'infiltration au sein de la plateforme.

Ce test étant seulement en une dimension, il faut maintenant passer à l'échelle du versant et simuler l'ensemble des processus couplés dominant le devenir de l'eau. L'étude porte d'abord sur le ruissellement avec une comparaison avec Cathy, puis avec Hydrus pour les écoulements de subsurface. En effet, Hydrus ne simule pas le ruissellement, qu'il considère seulement comme de l'accumulation d'eau en surface, c'est la raison pour laquelle nous avons opté à comparer le ruissellement avec Cathy.

II.3. Confrontation de CMF avec un benchmark de ruissellement

II.3.1. Contexte

Comme il est impossible de comparer le comportement de CMF avec Hydrus2D lorsqu'il y a du ruissellement de surface (Hydrus ne considérant que de l'accumulation d'eau en surface), nous avons choisi de comparer CMF avec un autre modèle couplé surface-subsurface. Il existe une grande variété d'approches pour résoudre le couplage des écoulements de surface et la modélisation des interactions surface-souterrain à l'échelle d'un versant ou un petit bassin versant (Sulis *et al.*, 2010). Plusieurs études se sont focalisé sur la séparation des flux de surface et de subsurface à travers soit l'analyse de l'hydrogramme de récession (Panday and Huyakorn, 2004; Werner *et al.*, 2006; Jones *et al.*, 2008; Partington *et al.*, 2009), soit les méthodes à base de traceurs (Jones *et al.*, 2006).

Le choix s'est porté sur un benchmark¹¹ publié par Sulis *et al.* (2010). Cette étude consiste en une comparaison de deux modèles, ParFlow (Ashby and Falgout, 1996; Kollet and Maxwell, 2006) et Cathy « CATchment HYdrology » (Bixio *et al.*, 2000; Camporese *et al.*, 2010) sur des versants virtuels, et qui consiste à une suite des travaux menés par Kollet *et al.* (2006), en se focalisant en partie sur la genèse du ruissellement. On a choisi de ne comparer CMF qu'avec les résultats de Cathy, parce que les résultats de Parflow sont proches, mais également parce que cela ne nécessitait pas de prendre en main un nouveau modèle supplémentaire, l'équipe Pollutions Diffuses ayant déjà travaillé avec Cathy. Nous avons facilement eu accès aux fichiers fournis par Sulis *et al.* (2010), qu'on remercie chaleureusement pour sa collaboration. De même que lorsque l'on compare avec Hydrus, il est important de discuter des résultats en gardant en tête les différences existant au niveau de la résolution numérique, des formalisations et des modes de couplage.

La suite de ce travail a été menée lors d'un workshop qui a été réalisé en 2013 dans le cadre d'un projet européen qui consiste en la comparaison de plusieurs modèles. Maxwell *et al.* (2014) présentent les résultats de la comparaison entre sept modèles adoptant différentes approches du couplage surface-subsurface : Cathy (Orlandini and Rosso, 1998; Bixio *et al.*, 2000), HydroGeoSphere (Therrien and Sudicky, 1996; Therrien, 2011), OGS (Delfs *et al.*, 2012; Delfs *et al.*, 2013), ParFlow (Kollet and Maxwell, 2006), PAWS (Shen and Phanikumar, 2010; Shen *et al.*, 2013), PIHM (Qu and Duffy, 2007; Kumar *et al.*, 2009) et tRIBS1 + VEGGIE (Ivanov *et al.*, 2004). Les résultats de cette comparaison ont montré un bon accord dans les cas de

¹¹ <http://igwmc.mines.edu/workshop/intercomparison.html>

tests simples, tandis que les cas de tests complexes ont permis de mettre en évidence les différences issues de la représentation des processus physiques, des solutions numériques et des différentes stratégies adoptées pour la représentation des flux et des pressions à l'interface surface-souterraine dans les différents modèles (Maxwell *et al.*, 2014)

II.3.2. Description du benchmark de Sulis *et al.* (2010)

Les travaux de Sulis *et al.* (2010) comparent ParFlow et Cathy sur deux types de versants virtuels : un versant plan incliné et un versant en talweg. Cette étude consiste à examiner les processus de genèse du ruissellement d'abord par excès de saturation puis par excès d'infiltration dans des conditions du sol homogène et hétérogène pendant un événement pluvieux de 200 min suivi de 100 min de récession. L'effet de certains paramètres a été étudié, en particulier le découpage spatial, la pente, le pas de temps et la discrétisation verticale. D'autres processus ont été étudiés tels que la dynamique de flux de retour¹², ou la différence de la réponse hydrologique dans le cas d'écoulements concentrés.

Les résultats ont montré que les variations de la discrétisation verticale et temporelle n'ont pas un effet significatif sur la réponse hydrologique dans les deux modèles dans le cas du ruissellement par excès de saturation dans des conditions du sol homogène. Une sensibilité plus importante à la discrétisation verticale a été observée sur la réponse hydrologique, en particulier pour ParFlow, lors du ruissellement hortonien. Les auteurs l'expliquent par la différence entre les méthodes numériques adoptées dans les deux modèles : ParFlow utilise la méthode de volumes finis tandis que Cathy adopte une résolution numérique suivant la méthode des éléments finis pour résoudre l'équation de Richards en 3 dimensions. Pour le ruissellement, Parflow utilise une onde cinématique en 2 dimensions, tandis que Cathy utilise une représentation plus conceptuelle (rill flow-based model) représentant l'écoulement en surface en une dimension suivant un arbre de drainage, et résolvant le flux par l'équation de Leopold and Maddock en adoptant une résolution en différences finies. Dans le cas du flux de retour, les résultats des deux modèles sont proches, avec un écart plus important pendant la récession. En outre, une réponse similaire a été observée en utilisant des paramètres équivalents dans les deux modèles dans le cas du ruissellement concentré et dans le cas du versant en talweg, qu'il s'agisse de la forme de l'hydrogramme ou des profils d'humidité. Pour les deux modèles, le raffinement du maillage joue un rôle important pour la convergence de la solution. Cathy a été reconnu plus sensible à la discrétisation temporelle que Parflow, du fait de son approche de couplage surface/subsurface plus séquentielle et basée sur des tests (« switch ») de condition à la limite en surface (passage de Neumann à Dirichlet ou inversement en fonction des variables d'état à chaque pas de temps).

¹² Le flux de retour est l'écoulement qui apparaît quand la nappe ou la frange capillaire est proche de la surface du sol, une petite quantité d'eau suffit à saturer le profil (ceci peut se produire par exemple si le type de sol change), cette eau revient en surface et ruisselle.

II.3.3. Elaboration et paramétrisation du benchmark

Dans le benchmark, nous avons choisi de comparer les simulations de la plateforme CMF avec les résultats de Cathy dans le cas d'un versant plan incliné soumis à une pluie qui induit du ruissellement. Ceci a deux bonnes raisons : la première est la stabilité de Cathy par rapport à la discrétisation verticale et temporelle dans les deux cas du scénarios de production du ruissellement (Dunne et Horton). La deuxième est qu'il nous semble qu'il vaut mieux se concentrer sur un cas simple en sol homogène pour en retirer les premières conclusions.

Ce benchmark aborde la genèse du ruissellement selon deux processus. Le premier est le ruissellement hortonien, qui apparaît lorsque l'intensité de la pluie dépasse la capacité d'infiltration de la première couche du sol (Kutilek and Nielsen, 1994). Dans ce cas d'étude, la profondeur initiale de la nappe phréatique a été fixée à 1 m, et deux valeurs de la conductivité hydraulique à saturation ont été étudiées (voir *Tableau 3*). Le deuxième processus est le ruissellement de Dunne, qui se produit après saturation complète du profil du sol, lorsque l'intensité des précipitations est inférieure ou égale à la conductivité hydraulique à saturation de la première couche du sol ou du profil du sol dans le cas d'un sol homogène (Kollet *et al.*, 2006). Deux tests sur l'influence de la position de la nappe à l'état initial ont été effectués. Enfin, nous avons étudié l'effet de la variation du pas de temps et de la pente sur la réponse hydrologique des deux modèles.

Le versant plan test illustré dans la *Figure 16* est de 400 m de long, 320 m de large et une profondeur du profil du sol de 5 m. Le versant a une pente de 0,05% avec une résolution de 80 m (5 x 4 mailles) dans Cathy. On considère une résolution horizontale suivant l'axe des x comparable à celle prise dans Cathy (80 m x 1 m), ce qui donne 5 mailles.

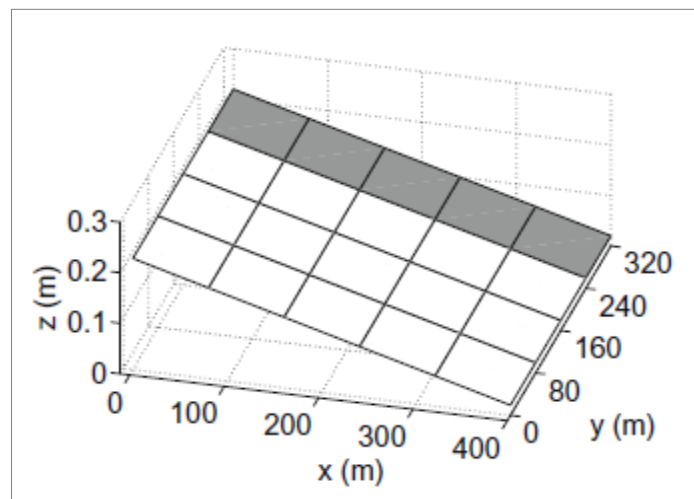


Figure 16 : Schéma du versant du benchmark avec le découpage adopté dans Cathy (Sulis *et al.*, 2010).

Choix de représentation des processus

Cathy adopte un modèle de Richards en 3D pour le couplage de la zone saturée et non-saturée (voir annexe 2 pour une brève description du modèle). Pour s'approcher au mieux de la représentation effectuée par Cathy, le couplage des processus dans CMF a été testé comme illustré dans la Figure 17 : l'infiltration est régie dans CMF par *MatrixInfiltration* à la première couche du sol et *Richards* dans les couches en subsurface. Les flux latéraux sont simulés par la fonction *Richards_lateral* entre les différentes mailles. En surface, on a testé plusieurs fonctions de ruissellement pour aboutir au choix de *KinematicSurfaceRunoff*. Les premières simulations sur le scénario du benchmark ont été menées avec la version de **CMF- 720** en vue de tester les deux fonctions du ruissellement présentées dans la section (II.3.4), *Manning_Kinematic* et *Manning_Diffusive*. Elles ont permis de montrer qu'elles ne peuvent pas rendre compte de façon correcte de l'infiltration à la surface du sol parce qu'il manque une instance permettant de conditionner l'infiltration et le ruissellement à partir de l'accumulation d'un certain volume d'eau à la surface. Ces fonctions sont en fait plutôt applicables pour la description du ruissellement dans les ruisseaux et les canaux. En conséquence, le développeur de CMF a implémenté une nouvelle fonction : *KinematicSurfaceRunoff* pour régler ce problème. Cette dernière ne permet le routage de l'eau du réservoir de stockage de surface vers un autre nœud, suivant la loi de Manning également, que quand la hauteur d'eau dépasse un seuil nécessaire pour que le ruissellement advienne (ponding).

$$q_{\text{runoff}} = A_{\text{cross}} d_{\text{eff}}^{2/3} \frac{\sqrt{S}}{n}, \text{ où : } d_{\text{eff}} = \begin{cases} \frac{V}{A} - d_{\text{puddle}} & \text{si } \frac{V}{A} > d_{\text{puddle}} \\ 0 & \text{si } \frac{V}{A} \leq d_{\text{puddle}} \end{cases} \quad (\text{II.1})$$

Où, q_{runoff} [L^3/T] est le débit de ruissellement; d_{eff} [L] est la profondeur effective du ruissellement de surface ; A_{cross} [L^2] est la section transversale mouillée correspondante à d_{eff} et donnée par $(d_{\text{eff}} \cdot w)$; w [L] est la largeur de la limite commune de connexion entre le réservoir de stockage amont et le nœud de destination ; V [L^3] est le volume stocké à la surface ; A [L^2] est l'aire des cellules; s est la pente entre le centre du ruissellement et le nœud de connexion ; n [L/T] est le coefficient de rugosité de Manning.

Les simulations qui suivent ont été menées en adoptant cette nouvelle fonction régissant le ruissellement sur le versant (voir *Figure 17*).

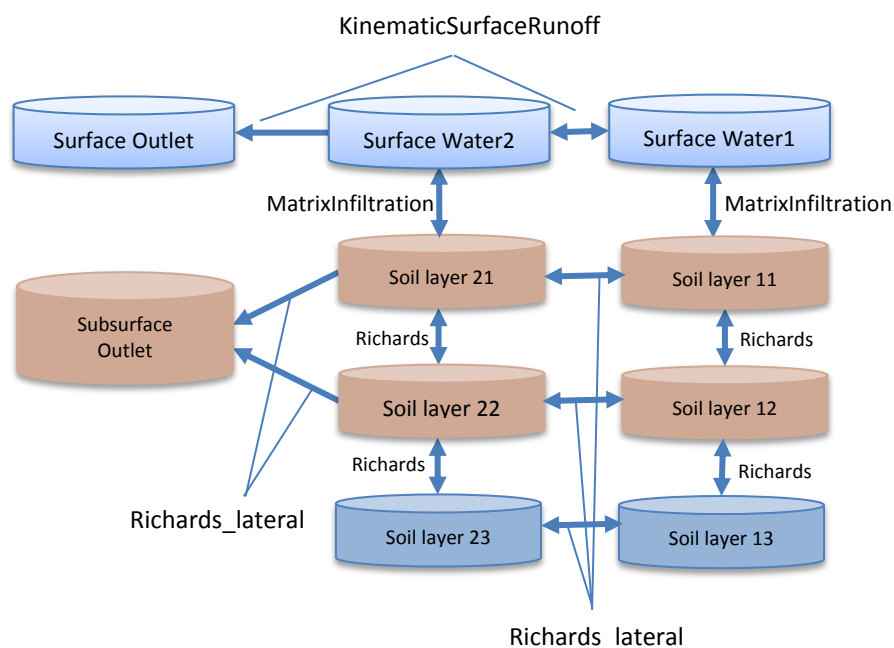


Figure 17 : Schéma du modèle dans CMF avec les fonctions adoptées pour représenter le transfert hydrique.

Paramétrisation du sol, conditions initiales et conditions à la limite

Les caractéristiques hydrodynamiques du sol sont données par les paramètres de Van Genuchten ($K_{sat} = 41,64 \text{ mm/h}$, $n = 2$, $\alpha = 0,01 \text{ cm}^{-1}$, $\theta_s = 0,4 \text{ mm}^3/\text{mm}^3$, $\theta_r = 0,08 \text{ mm}^3/\text{mm}^3$), ce qui correspond à un sol sableux-limoneux (catalogue Hydrus2D, Zhang et van Genuchten, 1994). Le coefficient de conductance de Gauckler-Strickler (k_s) a été maintenu constant dans l'espace et dans le temps dans Cathy et égal à $3,0 \times 10^3 \text{ m}^{1/3}/\text{min}$. En parallèle, nous avons considéré le coefficient de rugosité de Manning égal à l'inverse de Gauckler-Strickler, soit $3,3 \times 10^{-4} \text{ m}^{-1/3}/\text{min}$, comme dans le cas du Modèle ParFlow (pour ce benchmark) parce que CMF prend en compte le coefficient de Manning.

Des conditions atmosphériques ont été considérées à la surface du versant et un flux nul est imposé en bas de profil et à la frontière amont du versant. Une condition de flux nul a également été spécifiée dans Cathy à la frontière aval. Par conséquent, le flux observé correspond au seul flux du ruissellement de surface à l'exutoire. La simulation consiste en un événement pluvieux de 200 minutes, ayant une intensité uniforme de $0,33 \text{ mm}/\text{min}$, suivi de 100 minutes de récession. La simulation est réalisée avec un pas de temps de 1 min.

L'influence de la discrétisation verticale a été étudiée en variant l'épaisseur des couches numériques entre $0,0125 \text{ m}$ (400 couches) et $0,2 \text{ m}$ (25 couches) dans les deux modèles. Le Tableau 3 présente un récapitulatif des simulations faites avec CMF pour cette étape de comparaison avec Cathy, ainsi que les paramètres pris en compte.

Tableau 3 : Récapitulatif des simulations dans CMF.

Type de Ruissellement	Profondeur de la nappe (m)	Δz (m)	K_{sat} (mm/h)
Ruissellement de Dunne	1	0.0125, 0.025, 0.05, 0.1, 0.2	41.64
	0.5	0.0125, 0.025, 0.05, 0.1, 0.2	
Ruissellement Hortonien	1	0.0125, 0.025, 0.05, 0.1, 0.2	4.16
		0.0125, 0.025, 0.05, 0.1, 0.2	0.41

II.3.4. Analyse des résultats et corrections de la version de CMF disponible initialement

Les résultats de simulations pour les 4 cas de la genèse du ruissellement sont présentés dans la *Figure 18*. Ils ont été obtenus avec la version **CMF-0.771**. Les critères de comparaison entre le modèle Cathy et CMF sont le débit de pointe, le temps d'apparition du ruissellement (ponding), la durée de la récession. Les résultats montrent la stabilité de Cathy par rapport à la discrétisation verticale pour les deux cas étudiés. Dans le cas du ruissellement par saturation, nous remarquons que la réponse de CMF est cohérente avec celle de Cathy surtout pour ce qui concerne la dynamique, le pic de débit et la récession quand la nappe est à 0,5m de profondeur. Un retard important est observé dans la réponse de CMF et ce d'autant plus que la discrétisation verticale est grossière et la nappe profonde. Le débit et le volume restitué sont nettement sous-estimés dans le cas d'une nappe à 1 m de la surface, qui conduit même à une non-apparition du ruissellement pour la discrétisation verticale la plus grossière ($\Delta z = 0,2$ m).

Dans le cas du ruissellement hortonien, la réponse de Cathy est stable sauf dans le cas qui conjugue une faible conductivité hydraulique et une discrétisation grossière ($\Delta z = 0,2$ m) : nous remarquons alors une réponse tardive et une surestimation du débit maximal. La réponse de CMF est comparable à la réponse de Cathy dans le cas de faible conductivité ($K_{sat} = 0,41$ mm/h), avec un petit retard pour l'apparition du ruissellement (ponding) et une légère surestimation du débit maximal. La surestimation du débit est plus importante dans le cas d'une conductivité de $K_{sat} = 4,16$ mm/h et le ruissellement apparait alors tôt dans CMF par rapport à Cathy. La décrue est comparable entre les deux modèles quelle que soit l'épaisseur des couches numériques pour la faible conductivité ($K_{sat} = 0,41$ mm/h).

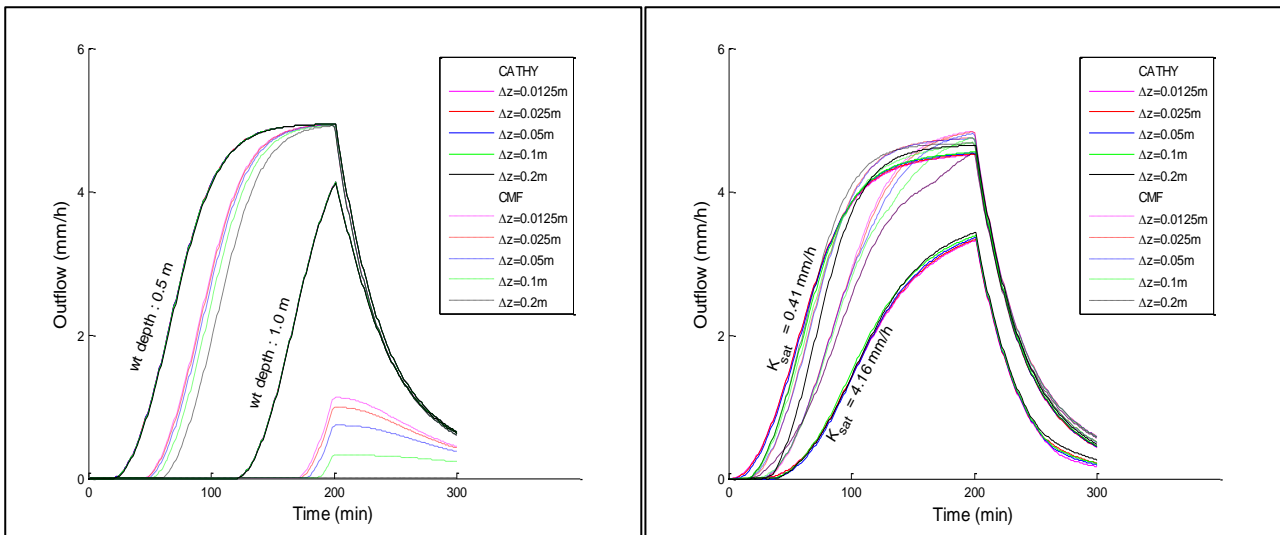


Figure 18 : Hydrogramme de flux (mm/h) à l'exutoire du versant ayant un sol sableux-limoneux dans le cas du ruissellement par excès de saturation pour différentes profondeurs de nappe (gauche) et par excès d'infiltration pour différentes conductivités hydrauliques à saturation (droite).

Afin de pouvoir comprendre le retard observé dans l'apparition du ruissellement dans CMF, ainsi que la sous-estimation du débit dans le cas d'une nappe phréatique plus profonde, nous avons établi les profils de pression pendant la simulation dans le cas du ruissellement de Dunne, présentés dans la Figure 19. La maille 5 (cell4) représente celle en amont du versant et, la première maille (cell0) correspond à la maille la plus en aval. La Figure 19 montre que les profils de charge hydraulique totale de chaque cellule au temps initial ne sont pas homogènes, laissant supposer que la condition d'équilibre hydrostatique au temps initial n'est pas respectée par CMF. De même, la Figure 20 illustre les profils de pression totale de la maille la plus en aval dans le cas du ruissellement par excès d'infiltration ($\Delta z = 0,0125$ m) et confirme que la pression totale, qui est bien identique dans la zone non-saturée (jusqu'à 1 m de profondeur), ne l'est pas du tout dans la zone saturée.

L'exploration du potentiel matriciel des différentes mailles des différents cas étudiés pour la genèse du ruissellement a permis de montrer que le potentiel total est correctement calculé au-dessus de la nappe. Cependant, des erreurs ont été mises en évidence dans la zone saturée. Ces erreurs sont liées à l'extrapolation parabolique qui est utilisée pour l'estimation du taux d'humidité dans la zone saturée. Cette formule est prescrite en fonction du paramètre « W_0 » qui représente la saturation maximale des couches de sol ($W_0 = 0,999787$) et Ψ_{i0} qui correspond au potentiel des couches saturées. Elle fournit par conséquent le degré de saturation si la donnée connue est le potentiel. Dans le cas contraire, quand on connaît plutôt l'humidité, l'inverse de cette formule est utilisé pour estimer le potentiel à la saturation. Ce système d'équations est résolu à l'aide d'un solveur algébrique. Des corrections de la méthode d'extrapolation parabolique ont alors été introduites par le développeur de la plateforme et une nouvelle version de CMF a été compilée. La modification de l'extrapolation parabolique a ainsi permis de résoudre le problème d'équilibre hydrostatique et d'aboutir à la version *CMF-0.822*.

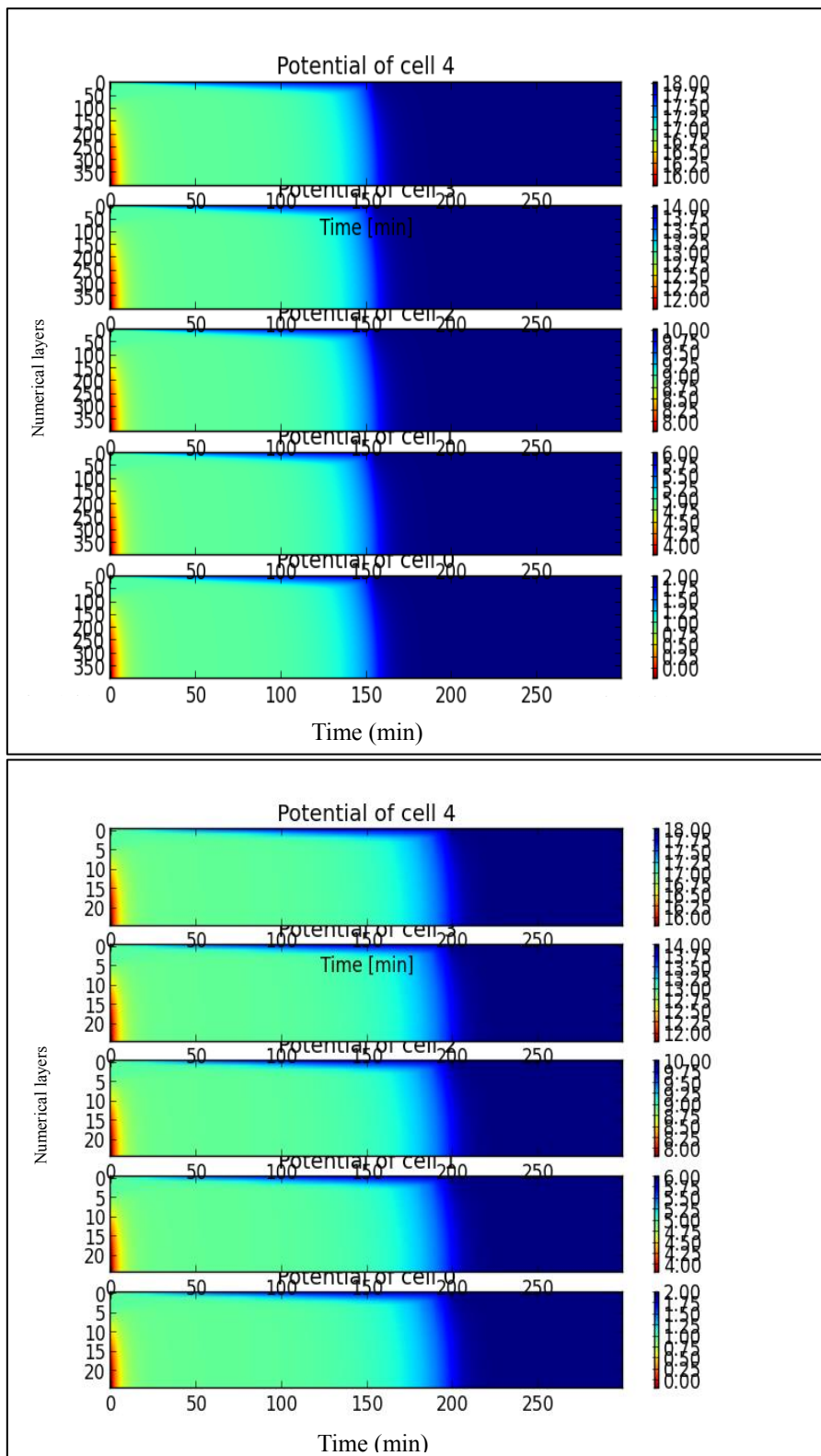


Figure 19 : Potentiel total des différentes mailles avec CMF dans le cas de la nappe à 1m, $\Delta z = 0,0125m$ (gauche) et $\Delta z = 0,2m$ (droite), en fonction du temps.

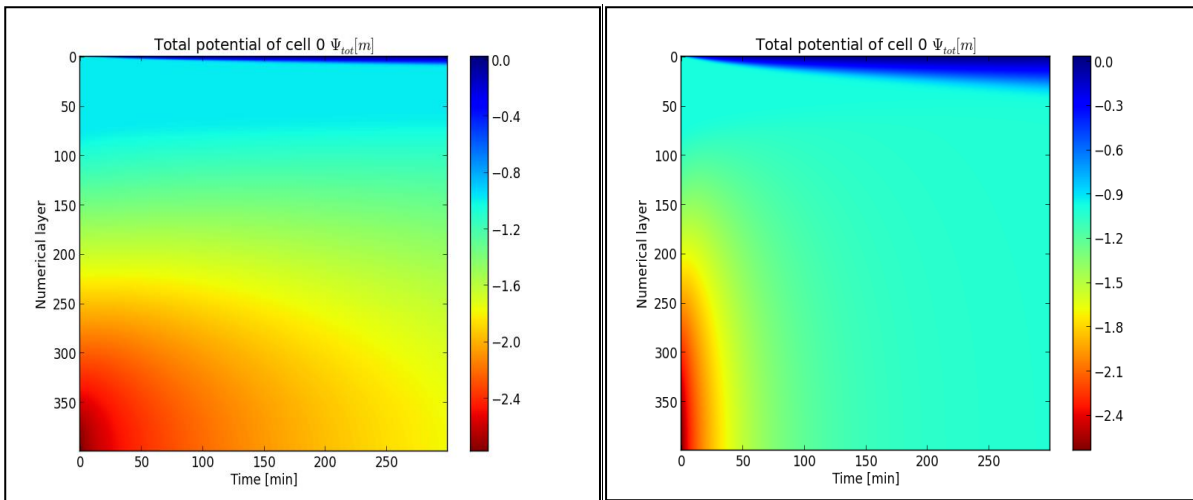


Figure 20 : Profil du potentiel total de la maille (0) avec CMF dans le cas du ruissellement hortonien : $K_{sat} = 4,16 \text{ mm/h}$ (droite) et $K_{sat} = 0,41 \text{ mm/h}$ (gauche).

Améliorations/Corrections de CMF : vers CMF-0.852

La Figure 21 présente les profils de pression totale produits par la nouvelle version **CMF-0.822** dans le cas de la discrétisation la plus fine ($\Delta z=0,0125\text{m}$). On remarque qu'à l'état initial, l'équilibre hydrostatique est bien vérifié. Les profils d'humidité montrent qu'à l'apparition du ruissellement le sol est complètement saturé.

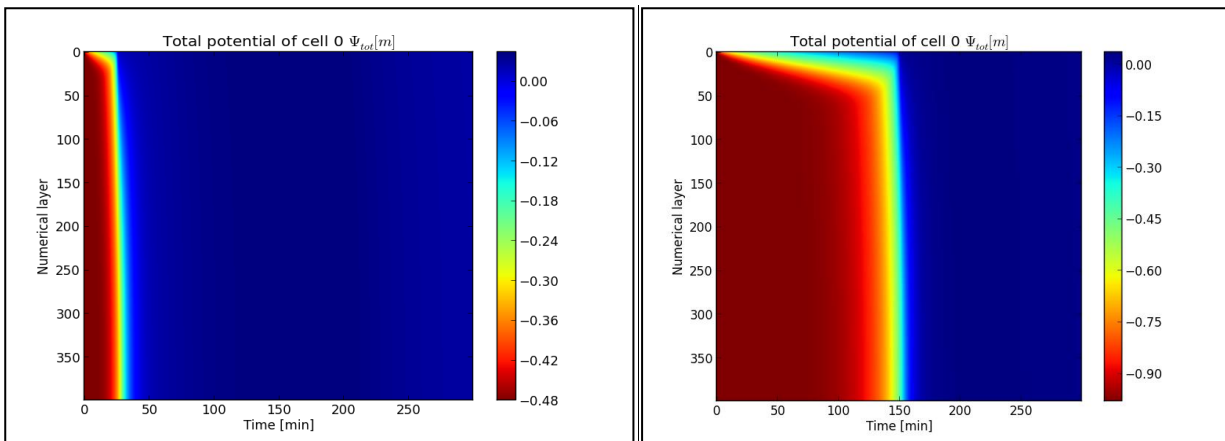


Figure 21 : Profil du potentiel total avec CMF dans le cas du ruissellement par excès de saturation pour une nappe à 0,5m (gauche) et la nappe à 1m (droite).

Après investigations dans la fonction Richards avec des collègues utilisant CMF dans le cadre d'un autre projet, nous avons découvert que l'estimation de la moyenne géométrique, qu'utilise CMF pour résoudre l'équation de Richards entre deux couches considérait en fait systématiquement que les conductivités hydrauliques étaient anisotropes suivant les trois directions spatiales. Un ratio de $\sqrt{3}$ a ainsi été détecté entre le débit estimé avec CMF et le débit attendu. Ce constat a conduit à une nouvelle correction et par conséquent une nouvelle version **CMF-0.852**.

Afin de tester la réponse de CMF suite à ces corrections primordiales dans le code, ainsi que pour comprendre la sous-estimation du flux du ruissellement par excès de saturation quand la nappe est profonde,

nous avons décidé de refaire les simulations précédentes avec la nouvelle version. La *Figure 22* présente les hydrogrammes obtenus, avec cette nouvelle version, que nous avons testée également avec une discrétisation verticale adaptative. Celle-ci consiste en une discrétisation fine (0,0125 m) pour les 50 premières centimètres, une discrétisation de 0,025 m pour l'intervalle de profondeur [0,5 m, 1 m], de 0,05 m entre [0,5 m, 2 m] et une discrétisation de 0,1 m entre [2 m, 5 m].

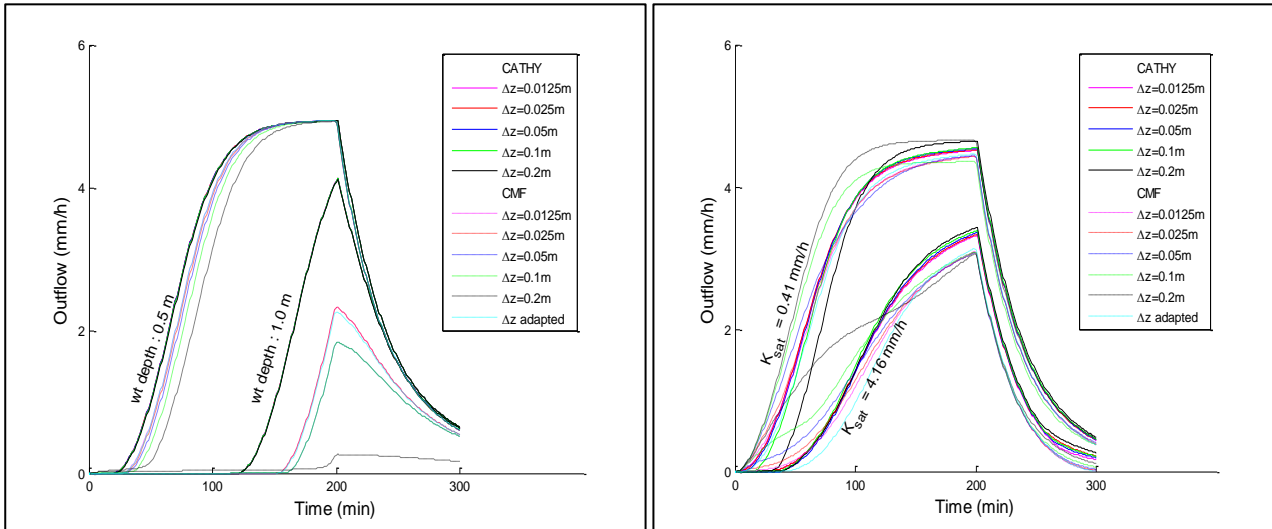


Figure 22 : Hydrogramme de flux à l'exutoire (mm/h) pour différentes discrétisations, dans le cas du ruissellement par excès de saturation avec deux profondeurs de nappe (à gauche) et par excès d'infiltration avec deux perméabilités différentes (à droite), avec la version CMF-0.852.

Si l'on observe d'abord uniquement les simulations différentes de CMF, on remarque que la réponse de CMF suivant la discrétisation adaptative se compare très bien avec celle suivant la discrétisation fine dans CMF surtout dans le cas du ruissellement de Dunne malgré une légère variation dans l'apparition du ruissellement dans le cas du ruissellement hortonien (*Figure 22*). Si l'on compare avec Cathy, nous remarquons que la réponse de CMF, dans le cas du ruissellement par excès de saturation, suivant les discrétisations fines ($< 0,5\text{m}$) ou la discrétisation adaptative sont très comparables à la réponse de Cathy pour la nappe à 0,5 m de la surface. Pour la nappe à 1 m de la surface, le débit reste sous-estimé par rapport à celui produit avec Cathy, et la résolution grossière (0,2 m) ne génère quasiment pas de ruissellement. Dans ce même cas, les réponses de CMF suivant les discrétisations fines et adaptative sont similaires et sont plus importantes d'un facteur de 2,05 à celles estimées avec la version précédente *CMF-0.822* (voir *Tableau 4*). Le ponding est observé dans Cathy après 19 min et 117 min du début de la simulation respectivement selon que la nappe est 0,5 m ou 1 m ; il apparaît dans CMF (Δz adaptatif ou fine) respectivement après 25 min et 150 min du début de la simulation.

Dans le cas du ruissellement hortonien, la réponse de CMF se compare assez bien avec Cathy dans le cas de faible conductivité hydraulique plus spécifiquement par rapport au temps et au débit du pic et à la décrue. Pour la conductivité plus forte, une sous-estimation du pic a été observée pour toutes les discrétisations étudiées. Par ailleurs, nous avons observé une apparition du ruissellement dans Cathy après 9 min et 35 min du début de la simulation et il apparaît dans CMF (Δz adaptatif) après 8 min et 41 min du

début de la simulation dans le cas de faible ($K_{sat} = 0,41$ mm/h) et forte conductivité ($K_{sat} = 4,16$ mm/h), respectivement. Ces différences dans la réponse des deux modèles peuvent être expliquées par la différence de la résolution numérique. En effet, Cathy adopte une résolution aux éléments finis : dans le cas du ruissellement par excès d'infiltration, les couches en surface, même grossières, peuvent être saturées en surface et non en bas de l'élément. Ceci peut également générer le ruissellement par excès de saturation si la couche de surface est saturée. La décrue est comparable entre les deux modèles dans le cas du ruissellement hortonien.

Le *Tableau 4* récapitule les débits et les temps de pic correspondant pour chaque cas de genèse du ruissellement dans Cathy et les deux versions CMF-0.771 et CMF-0.852, qui incluent les corrections concernant la définition de l'équilibre hydrostatique à l'état initial pour la première version et l'anisotropie pour la deuxième version. Les débits de pics indiqués sont ceux résultant de la discrétisation la plus fine ($\Delta z = 0,0125$ m). On remarque que les pics des débits sont proches par rapport à ceux de Cathy, sauf dans le cas du ruissellement par excès de saturation, quand la nappe est à 1m de la surface. Le temps de montée aux pics sont similaires.

Tableau 4 : Résumé des débits des pics de simulations dans CMF et Cathy avec la résolution la plus fine.

Simulation	CMF -0.771		CMF -0.852		Cathy 3D	
	Q_{peak} (m ³ /min)	t_{peak} (min)	Q_{peak} (m ³ /min)	t_{peak} (min)	Q_{peak} (m ³ /min)	t_{peak} (min)
Dunne (nappe 1m)	2,411	201	4,955	200	8,82	200
Dunne (nappe 0,5m)	10,55	201	10,49	200	10,54	201
Horton ($K_{sat} = 4,16$ mm/h)	9,75	199	9,48	199	9,64	200
Horton ($K_{sat} = 0,41$ mm/h)	10,39	200	6,57	200	7,092	201

Les bilans d'eau sont présentés dans le *Tableau 5* pour les différentes discrétisations verticales, pour les quatre cas étudiés. Nous avons allongé les simulations jusqu'à 400 min en vue d'atteindre la fin du ruissellement dans les différents cas étudiés. On constate que l'erreur est variable selon les scénarios étudiés, même si elle reste raisonnable en termes de bilan avec un maximum de 2%. Les grandes différences de simulations entre les modèles en particulier pour les scénarios par excès de saturation ne s'expliquent donc pas par un mauvais bilan mais par l'infiltration qui se comporte de façon très différente dans les deux modèles.

Tableau 5 : Bilans d'eau des simulations CMF-0.852 sur les scénarios du benchmark.

Simulations / discrétisation verticale	0,0125	0,025	0,05	0,1	0,2	Δz adapté
Dunne (nappe 0,5m)	0,49%	0,48%	0,69%	0,83%	1,47%	0,52 %
Dunne (nappe 1m)	1,86%	1,92%	1,98%	2,3%	2,7%	1,89 %
Horton ($K_{sat} = 4,16$ mm/h)	1,48%	1,51%	1,53%	1,43%	1,98%	0,49 %
Horton ($K_{sat} = 0,41$ mm/h)	0,27%	0,28%	0,30%	0,48%	1,15%	0,29 %

Sensibilité à la discrétisation verticale

Sulis et al. (2010) ont proposé une mesure quantitative pour tester l'effet relative par rapport à la discrétisation verticale la plus fine, qui est considérée la plus adaptée. Cette erreur relative est estimée pour chaque discrétisation verticale via la formule suivante, qui représente la différence des flux à l'exutoire par rapport aux flux correspondant à la discrétisation la plus fine :

$$\varepsilon_i = \sqrt{\sum_{j=1}^N [(Q_j^{(i)} - Q_j^{(f)}) \Delta t]^2}, \text{ pour l'ensemble des pas de temps } j, \text{ de } 1 \text{ à } N. \quad (\text{II.2})$$

Où, $Q_j^{(i)}$ est le débit correspondant à la discrétisation verticale (i) ; $Q_j^{(f)}$ est le débit correspondant à la discrétisation verticale la plus fine pour chaque modèle ($\Delta z = 0,0125$ m) ; N est le nombre de pas de temps ; Δt est le pas de temps.

Dans le cas de ce benchmark, la vraie solution est inconnue et par conséquent, Sulis *et al.* (2010) ont comparé les différences entre les solutions obtenues à une résolution verticale donnée et celle simulée à la plus fine discrétisation. La *Figure 23* montre les erreurs relatives estimées pour CMF et Cathy pour les 4 scénarios étudiés. La discrétisation adaptative pour CMF est représentée au même point que la plus fine, soit $\Delta z = 0,0125$ m. Nous remarquons que la différence de l'erreur relative est plus importante pour CMF et plus faible pour Cathy dans les deux cas du ruissellement par excès de saturation.

L'erreur est également plus importante dans le cas des discrétisations grossières par rapport à la plus fine pour les deux modèles. De plus, on remarque que cette erreur suit la même vitesse de croissance pour les deux modèles : quelle que soit la résolution de CMF, l'écart évolue de la même façon qu'avec la discrétisation de Cathy. Seul le cas c) du ruissellement par excès d'infiltration avec une faible conductivité hydraulique à saturation permet de voir converger les deux erreurs de modèles pour la discrétisation la plus grossière. Globalement, l'erreur de la discrétisation adaptative par rapport à la discrétisation fine ($\Delta z = 0,0125$ m) est similaire aux discrétisations fines ($< 0,05$ m) dans le cas du ruissellement de Dunne. En revanche, elle est plus importante dans le cas du ruissellement hortonien.

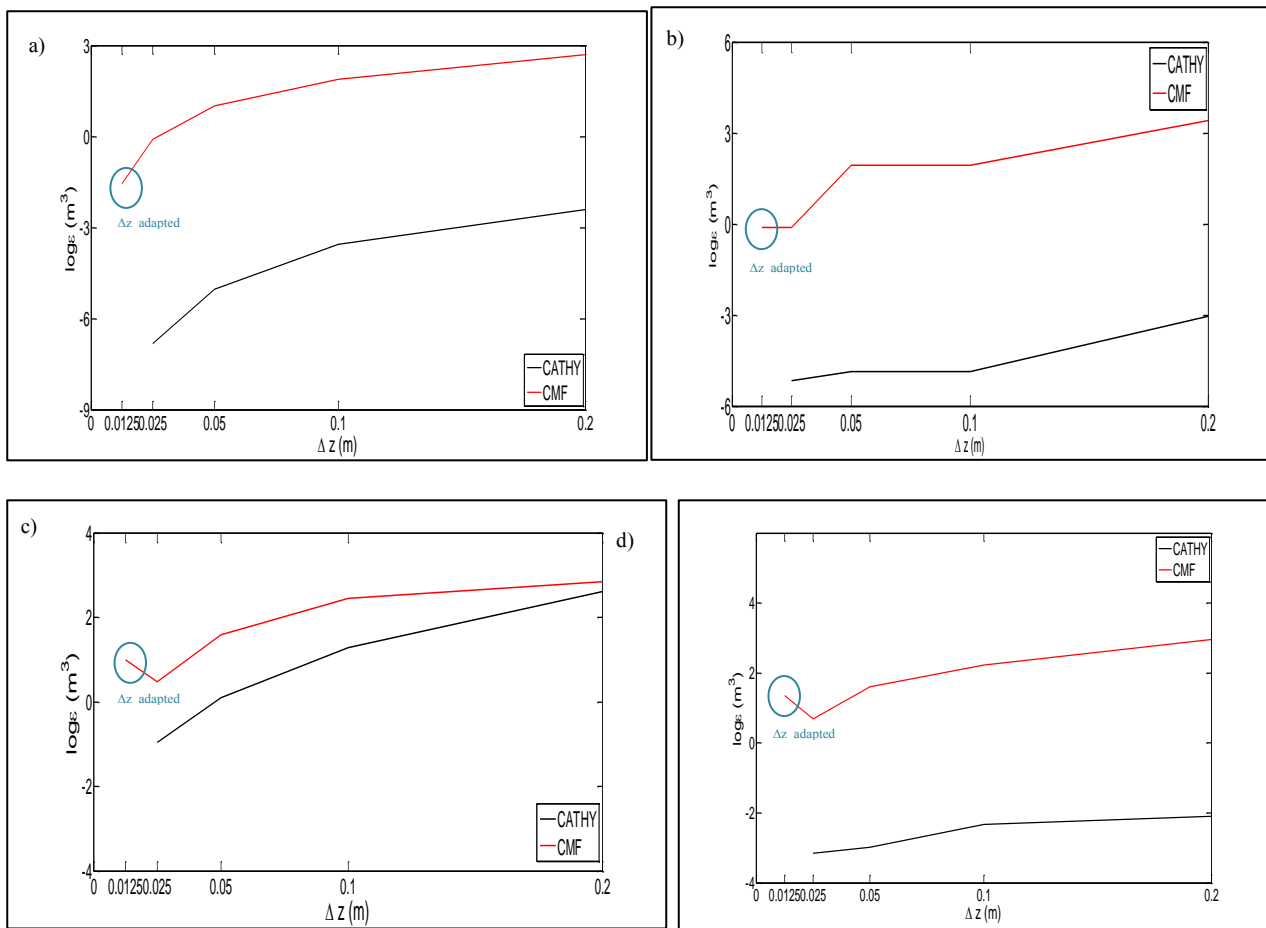


Figure 23 : Erreur relative (en \log_{10}) en fonction de la discrétisation verticale. Haut : ruissellement par excès de saturation a) nappe à 0,5m b) nappe à 1m. Bas : ruissellement par excès d'infiltration c) $K_{sat} = 0,41$ mm/h d) $K_{sat} = 4,16$ mm/h.

Sensibilité à la discrétisation temporelle

Une analyse de sensibilité par rapport à la discrétisation temporelle a été faite par Sulis *et al.*, (2010) dans leur comparaison de ParFlow et Cathy sur le versant présenté dans la section (II.3.3), pour deux pentes de 0,05% et 5% et pour les deux types de ruissellement : Dunne et Horton. Cette étude consistait à varier le pas de temps entre 1 min, 5 min et 10 min dans ParFlow, en le considérant constant tout le long de la simulation. Dans Cathy, un pas de temps constant n'a été utilisé que pour le cas $\Delta t = 1$ min. Pour les autres simulations dans Cathy, le pas de temps est adapté au fil des simulations, et un pas de temps moyen (Δt_{avg}) est estimé à partir des pas de temps initial, minimum et maximum donnés. Les pas de temps moyens pris dans Cathy sont 4,6 min et 7,8 min pour chaque pente étudiée. Dans la mesure où CMF considère un pas de temps constant au cours de la simulation, j'ai choisi des pas de temps identiques à ceux pris dans ParFlow.

La discrétisation verticale considérée dans cette section est de $\Delta z = 0,0125$ m (400 couches). La position initiale de la nappe est supposée à 0,5 m de la surface dans le cas du ruissellement de Dunne et à 1 m de la surface dans le cas du ruissellement par excès d'infiltration, avec une conductivité $K_{sat} = 4,16$ mm/h. Figure 24 et Figure 25 représentent le débit estimé à l'exutoire avec respectivement CMF et Cathy et en considérant deux pentes de 0,05% et 5%. Cette analyse montre la stabilité de CMF par rapport à la

discrétisation temporelle. Un petit retard de la réponse de CMF est toutefois observé dans le cas du ruissellement par excès de saturation et une sous-estimation du débit dans le cas du ruissellement par excès d'infiltration quelle que soit la discrétisation et la pente adoptée.

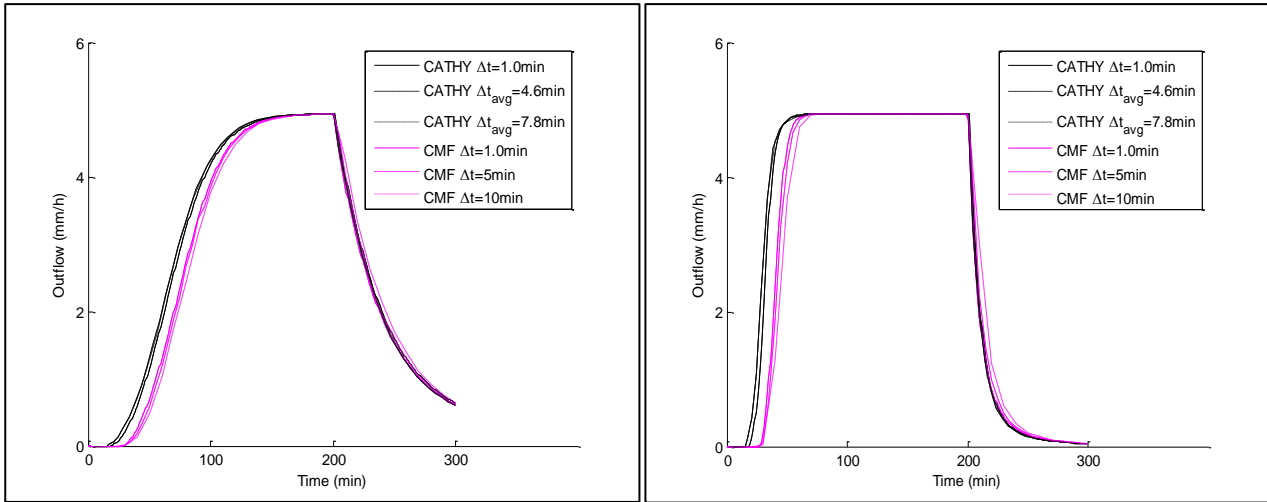


Figure 24 : Flux à l'exutoire (mm/h) dans le cas du ruissellement par excès de saturation ($K_{sat} = 41,64$ mm/h) dans le cas d'une pente à 0,05% (gauche) et 5% (droite).

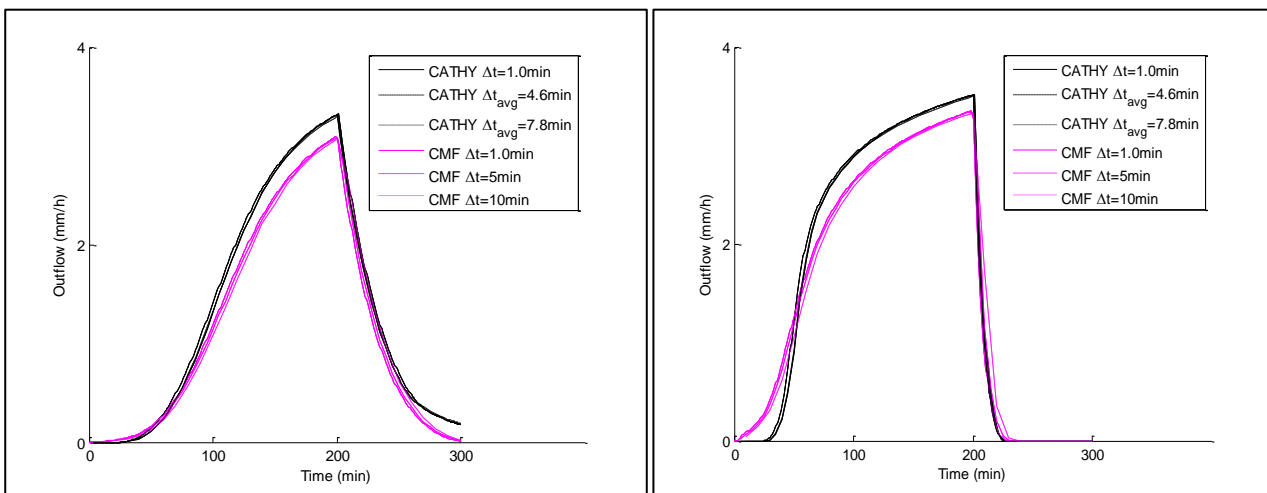


Figure 25 : Flux à l'exutoire (mm/h) dans le cas du ruissellement par excès d'infiltration ($K_{sat} = 4,16$ mm/h) dans le cas d'une pente à 0,05% (gauche) et 5% (droite).

Conclusion

Les différents tests présentés ci-dessus ont permis d'identifier certains problèmes dans la réponse hydrologique de la plateforme CMF (fonction représentant le ruissellement, la condition d'équilibre hydrostatique, l'anisotropie de la conductivité hydraulique) : ces problèmes ont été résolus par le concepteur, et une nouvelle version élaborée. Toutefois, ces améliorations n'ont pas permis d'améliorer la réponse de CMF dans le cas du ruissellement par excès de saturation avec une nappe à 1 m de profondeur, qui provient clairement de la fonction d'infiltration en surface : *MatrixInfiltration*. Celle-ci adopte une moyenne géométrique entre la conductivité à saturation et la conductivité actuelle de la surface, faible quand le sol est sec. En se basant sur notre connaissance des modèles hydrologiques, qui considèrent en général que

l'infiltration à la surface se produit à un taux égal à la conductivité hydraulique à saturation tant que la couche de surface n'est pas saturée (Musy, 1998), nous avons décidé de remplacer la moyenne géométrique utilisée dans CMF par la conductivité hydraulique à saturation. Une fois la première couche saturée, un écoulement de surface se produira. Nous avons donc proposé une nouvelle version **CMF-0.967**, qui a été compilée et les scénarios précédents ont été simulés de nouveau afin de juger de l'amélioration apportée pour cette comparaison de CMF avec un benchmark.

II.3.5. Nouvelle version de CMF-0.967

Reproduction des scénarios précédents

Nous avons reproduit les simulations précédentes avec **CMF-0.967**. Je présente dans la *Figure 26* seulement les hydrogrammes obtenus suivant les discrétisations la plus fine (0,0125 m) et adaptative pour CMF contre la résolution la plus fine pour Cathy, dans les deux cas de genèse du ruissellement étudiés, en vue de mieux juger de l'amélioration apportée avec cette nouvelle version. Les résultats montrent que le temps et les débits des pics ainsi que l'allure des hydrogrammes sont similaires entre les deux modèles (voir *Tableau 6*). Par ailleurs, la récession est plutôt rapide par rapport à Cathy et aux versions précédentes de CMF. Dans le cas du ruissellement par excès de saturation, nous observons un peu de retard dans l'apparition du ruissellement, qui est plus important dans le cas de la nappe à 1 m de la surface. Une amélioration remarquable dans la réponse de CMF a été observée dans le cas du ruissellement par saturation dont la nappe à 1 m de la surface, ce qui est bien ce que nous recherchions avec cette nouvelle version. Cette amélioration a été observée pour toutes les discrétisations étudiées, notamment la discrétisation grossière (0,2 m) où le débit reste sous-estimé. Dans le cas du ruissellement hortonien, globalement, les deux modèles conduisent à des réponses proches pour ce qui concerne l'apparition du ponding et le temps du pic, ainsi que pour le débit maximal. La signature est proche de celle de Cathy dans le cas d'une faible discrétisation. Pour les discrétisations grossières, le débit est surestimé avec CMF. La récession est rapide avec cette version de CMF dans les 4 cas étudiés.

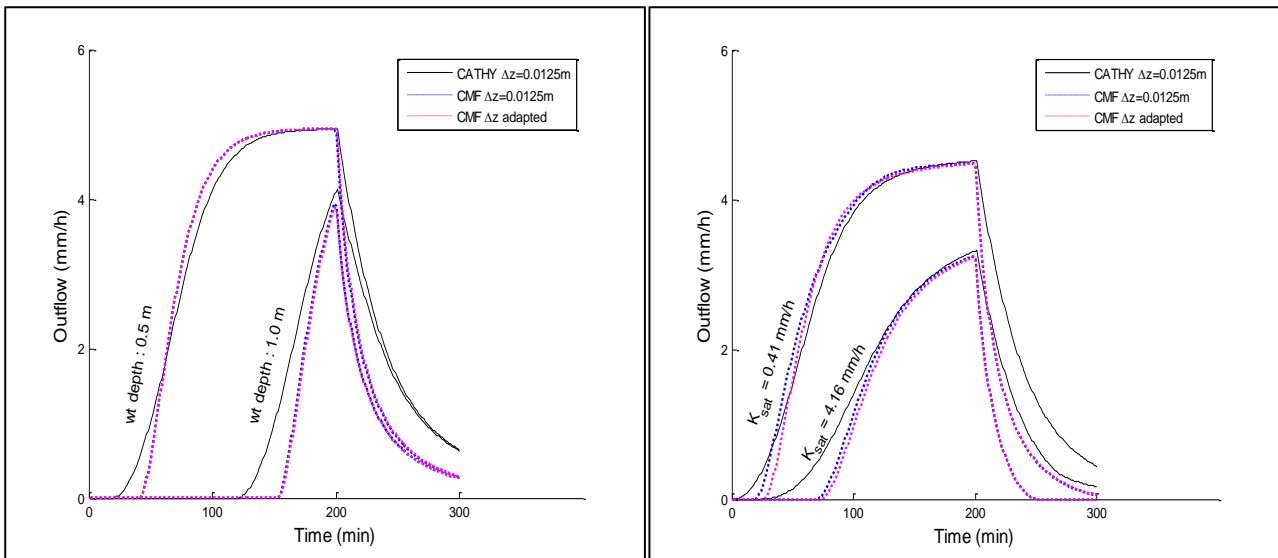


Figure 26 : Hydrogramme de flux à l'exutoire dans le cas du ruissellement par excès de saturation (gauche) et par excès d'infiltration (droite) avec CMF-0.967.

Le *Tableau 6* récapitule les débits et les temps de pic correspondant pour chaque cas de genèse du ruissellement dans Cathy et les deux versions **CMF-0.967** ($\Delta z = 0,0125$ m). Nous remarquons que les débits, leurs pics, ainsi que les dynamiques se comparent bien entre les deux modèles. Par ailleurs, le *Tableau 7* présente les bilans d'eau des quatre cas étudiés sur une période de 400 min dans le cas du ruissellement par excès de saturation et 300 min dans le cas du ruissellement par excès d'infiltration. On remarque que l'on a fortement diminué les erreurs de bilans également, et que ceux-ci sont faibles pour les résolutions verticales fines.

Tableau 6 : Résumé des débits des pics de simulations dans CMF-0.967 et Cathy.

Simulations	CMF -0.967		Cathy 3D	
	Q_{peak} (m ³ /min)	t_{peak} (min)	Q_{peak} (m ³ /min)	t_{peak} (min)
Dunne (nappe 1m)	8,40	200	8,82	200
Dunne (nappe 0,5m)	10,55	199	10,54	201
Horton ($K_{\text{sat}} = 4,16$ mm/h)	9,45	200	9,64	200
Horton ($K_{\text{sat}} = 0,41$ mm/h)	6,93	199	7,092	201

Tableau 7 : Bilans d'eau des simulations CMF sur les scénarios du benchmark.

Simulations	0,0125	0,025	0,05	0,1	0,2	Δz adapté
Dunne (nappe 0,5m)	0,47%	0,48%	0,69%	1,83%	1,87%	0,48 %
Dunne (nappe 1m)	0,86%	0,92%	0,98%	1,3%	1,7%	0,89 %
Horton ($K_{sat} = 4,16$ mm/h)	0,58%	0,61%	0,63%	0,43%	0,89%	0,59 %
Horton ($K_{sat} = 0,41$ mm/h)	0,22%	0,25%	0,30%	0,58%	0,75%	0,24 %

Nous ne disposons pas des profils d'humidité simulés dans Cathy, qui ne faisaient pas partie des résultats analysés par le modélisateur dans le cas de ce cas d'étude. La comparaison est donc impossible. De ce fait, nous avons exploré les profils d'humidité de CMF dans les deux mailles amont et aval dans la Figure 27 suivant la discrétisation la plus fine, pour juger de façon qualitative de leur évolution. Ceci a été fait à la fois dans le cas du ruissellement par excès de saturation (nappe à 1m) et dans le cas de l'excès d'infiltration ($K_{sat} = 41,64$ mm/h). Nous remarquons que les profils sont identiques dans le cas du ruissellement par saturation ce qui vérifie bien que le sol est saturé jusqu'à la fin de la simulation et ce qui correspond bien dans les hydrogrammes à la fin du ruissellement. Par ailleurs, dans le cas du ruissellement hortonien, la maille la plus en aval est dé-saturée par rapport à la maille la plus en amont.

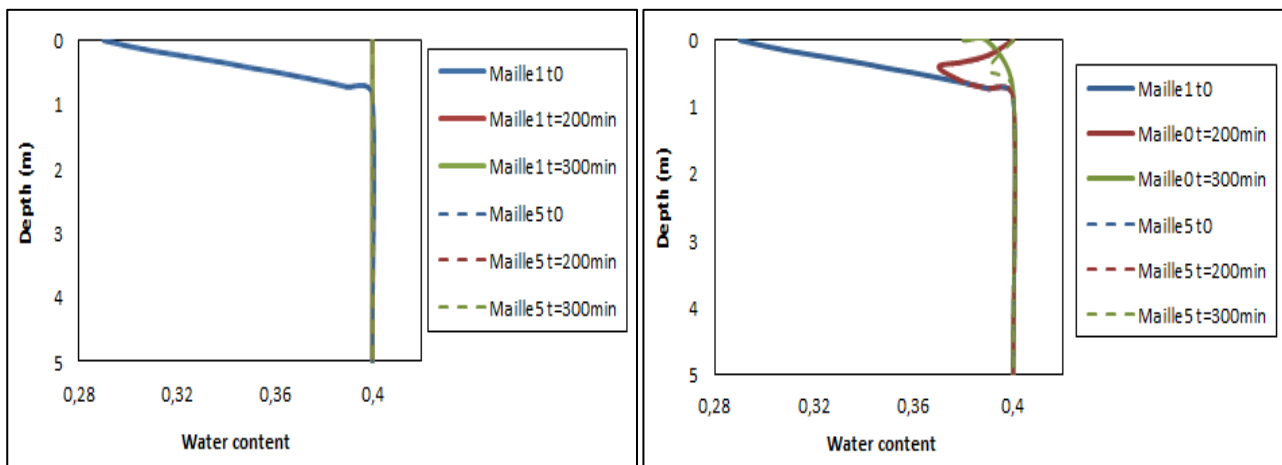
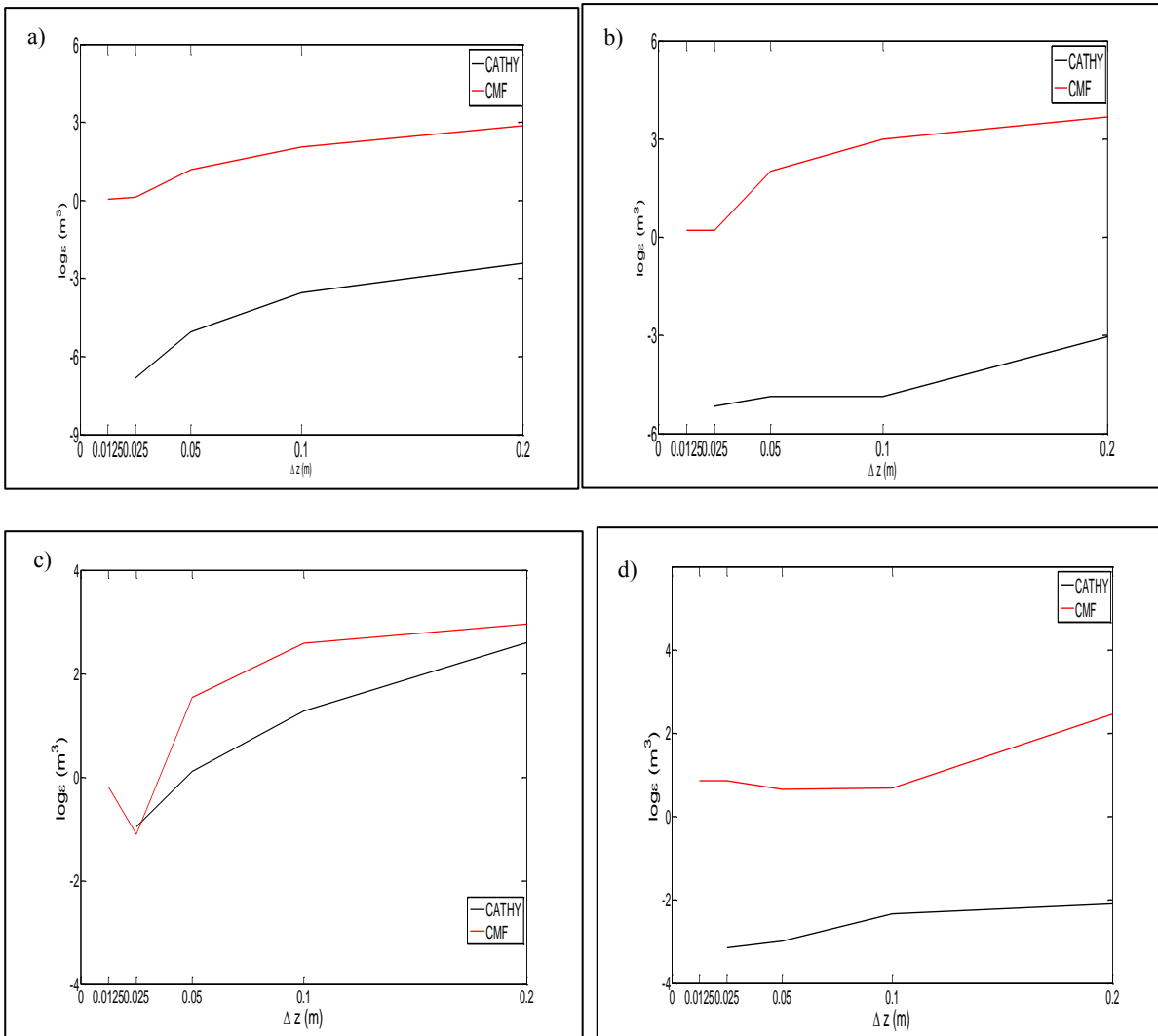


Figure 27 : Teneur en eau dans CMF de la maille la plus en aval (Maille1) et la plus en amont (Maille5) à différents temps dans le cas du ruissellement saturation (nappe à 1m gauche) et par excès d'infiltration ($K_{sat} = 4,16$ mm/h droite).

Sensibilité à la discrétisation verticale

La Figure 28 représente les erreurs relatives estimées pour CMF-0.967 et Cathy pour les 4 scénarios étudiés. On remarque une amélioration avec cette nouvelle version de CMF dans le cas du ruissellement hortonien, pour les résolutions verticales fines ($< 0,05$ m), notamment pour de faibles conductivités, où l'erreur liée à la discrétisation se rapproche de celle obtenue dans Cathy. La discrétisation adaptative est semblable à la discrétisation fine ($\Delta z = 0,025$ m) dans les différents cas, sauf pour le ruissellement hortonien

avec une faible conductivité (*Figure 28-c*). En effet, on remarque dans la *Figure 26* un décalage du déclenchement du ruissellement, qui explique une erreur un peu supérieure de la discrétisation adaptée par rapport à la discrétisation fine.



*Figure 28 : Erreur relative (en log₁₀) en fonction de la discrétisation verticale.
Haut : ruissellement par excès de saturation a) nappe à 0,5 m b) nappe à 1 m.
Bas : ruissellement par excès d'infiltration c) K_{sat} = 0,41 mm/h d) K_{sat} = 4,16 mm/h.*

Sensibilité à la discrétisation temporelle

Une analyse de sensibilité par rapport à la discrétisation temporelle a été menée également avec la nouvelle version **CMF-0.967**. Le débit estimé à l'exutoire avec CMF et Cathy en considérant deux pentes 0,05% et 5% dans le cas du ruissellement par excès de saturation et par excès d'infiltration est représenté dans la *Figure 29* et *Figure 30*, respectivement. Nous avons observé que la discrétisation temporelle n'a pas un effet significatif sur la réponse de CMF. Cette dernière est très comparable à Cathy dans le cas du ruissellement de Dunne et notamment dans la décrue. Le temps de l'apparition de la pluie est aussi comparable à Cathy en comparant à la version précédente de CMF, notamment dans le cas de la pente à 5%. Une légère sous-estimation a été observée dans CMF dans le cas du ruissellement hortonien à 5% de pente.

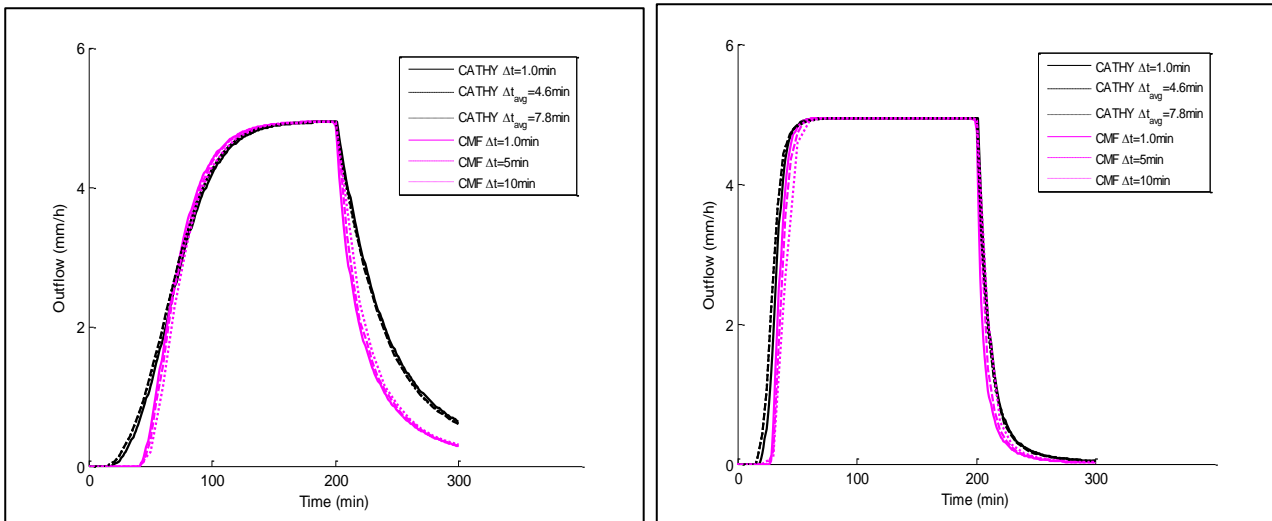


Figure 29 : Flux à l'exutoire dans le cas du ruissellement par excès de saturation pour les deux pentes 0,05% (gauche) et 5% (droite).

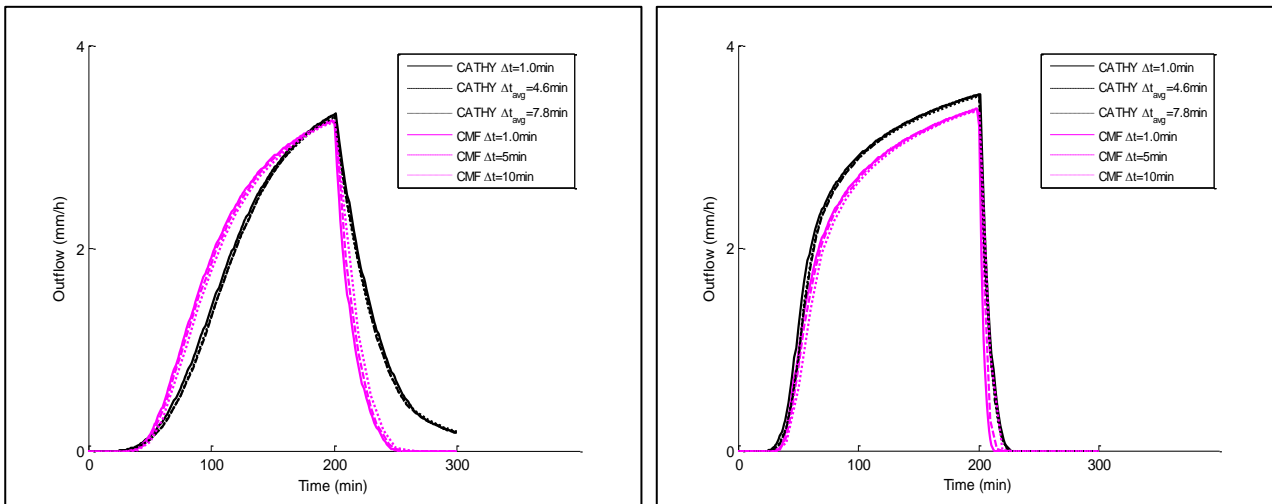


Figure 30 : Flux à l'exutoire dans le cas du ruissellement par excès d'infiltration à 0,05% (gauche) et 5% (droite) de pente.

II.3.6. Conclusion

Cette confrontation des résultats de CMF avec un benchmark a permis d'identifier que les deux fonctions de ruissellement pré-existantes, *Manning_Kinematic* et *Manning_Diffusive*, ne sont pas adaptées au ruissellement sur le versant mais plutôt aux écoulements dans les cours d'eau et les ruisseaux. Ce travail a conduit au développement d'une nouvelle fonction *KinematicSurfaceRunoff*, plus adaptée au ruissellement sur les terrains agricoles. Les simulations effectuées dans le cadre de la comparaison de CMF avec le benchmark (Sulis et al., 2010) ont permis d'étudier la façon dont CMF gère les processus de génération du ruissellement, tant par excès de saturation que par excès d'infiltration. Cette comparaison a permis d'apporter plusieurs corrections dans le code initial de la plateforme hydrologique CMF. Ainsi, la représentation de l'équilibre hydrostatique, l'anisotropie de la conductivité hydraulique et la représentation de l'infiltration en surface ont été améliorées. Ces améliorations successives ont impliqué de répéter les simulations réalisées pour le benchmark avec plusieurs versions de CMF, ce qui a pris beaucoup de temps.

La dernière version compilée, CMF-0.967, a donné des résultats comparables avec Cathy pour ce qui concerne le débit et le temps d'atteinte du pic. Un retard dans le ruissellement est toutefois observé dans le cas du ruissellement par excès de saturation pour une nappe à 1 m de la surface, pour lequel nous obtenons pourtant des débits maximaux comparables à ceux de Cathy, pour de faibles épaisseurs des couches numériques. Des résultats similaires dans les deux modèles ont été obtenus dans le cas du ruissellement hortonien avec un léger retard dans l'apparition du ruissellement qui a été observé dans CMF par rapport à Cathy, ce qui est dû à la différence de la résolution numérique entre les deux modèles. Comme déjà évoqué, Cathy se base sur une résolution aux éléments finis et qui considère, par conséquent, une saturation des couches en surface sans que ces dernières soient saturées en bas de l'élément, ce qui permet de déclencher le ruissellement hortonien plus rapidement dans Cathy (Sulis *et al.*, 2010). CMF au contraire adopte une résolution aux volumes finis, qui prend en compte l'état de saturation de l'ensemble de la couche/réservoir de stockage, ce qui implique un retard dans l'apparition à la fois du ruissellement par saturation et du ruissellement hortonien. Les temps de transferts simulés par CMF sont plus proches de ceux de Cathy dans le cas d'une forte pente, car le gradient topographique intervient fortement dans le ruissellement. Pour conclure cette partie concernant la discrétisation verticale, CMF montre de meilleurs résultats pour une discrétisation fine, au moins pour les couches les plus superficielles (0 - 50 cm). Par ailleurs, CMF a montré une stabilité par rapport au pas de temps utilisé, et conduit à une réponse assez proche de celle de Cathy dans le cas de la pente à 5%. La récession est rapide dans le cas de faible pente (0,05%) et semblable à Cathy dans le cas de pente à 5%. Le bilan d'eau est bien bouclé dans CMF et l'erreur est très faible dans les deux cas de Dunne et Horton.

Nous avons adopté, lors de cette comparaison avec un benchmark, un découpage spatial correspondant à celui de Cathy et qui a permis d'aboutir à des résultats similaires entre les deux modèles dans le cas de l'étude de la genèse du ruissellement. Par ailleurs, nous admettons que la discrétisation horizontale est un facteur important à tester et il convient d'estimer son influence sur la réponse hydrologique de CMF, notamment, son influence sur le transfert de subsurface. Pour cette raison, nous avons choisi d'évoquer ce paramètre dans la section suivante qui se focalise sur la comparaison de CMF avec Hydrus2D. Dans la dernière partie de ce chapitre, nous abordons donc le transfert en subsurface et les flux à l'exutoire sur des versants proches de celui de la Morcille.

II.4. Comparaison des résultats obtenus avec CMF et Hydrus2D sur un versant inspiré du versant expérimental de la Morcille

II.4.1. Méthodologie

Cette partie de notre étude est destinée à mieux cerner la réponse de la plateforme CMF pour les transferts en subsurface et les échanges avec l'exutoire. Nous pourrions ici notamment analyser les profils d'humidité du sol, et les comparer avec ceux simulés par Hydrus2D. Le choix de Hydrus2D (Simunek *et al.*, 1999; Šimunek *et al.*, 2006b) nous permettra de continuer la comparaison et la validation de la modélisation

développée avec CMF pour le reste du travail. En effet, le modèle Hydrus2D est une référence internationale pour la modélisation du transfert d'eau et des solutés dans les milieux stratifiés variablement saturés, et propose plusieurs représentations pour rendre compte des transferts préférentiels (Simunek *et al.*, 2003; Kohne *et al.*, 2009b). Une brève description de Hydrus2D est donnée dans l'annexe (3).

La comparaison effectuée ici est basée sur une conceptualisation proche entre les modèles, tout en restant conscient des différences en termes de discrétisation, de résolution numérique, et de couplage des processus. Le versant choisi pour cette partie est relativement proche de celui de la Morcille mais on a choisi une topographie simple et un sol homogène. Le versant est composé d'une parcelle de 5% de pente, connectée à un cours d'eau. Par ailleurs, nous avons testé deux types de sol. Le premier sol est le sol limoneux-sableux modélisé dans la section (II.2.2) tandis que le deuxième correspond au premier horizon du versant expérimental de la Morcille, dont les caractéristiques hydrodynamiques sont issues de l'étude cartographique du sol du bassin versant de la Morcille et correspondent à l'unité typologique du sol UTS1, qui se situe sur l'unité cartographique du sol UCS1 (sol sableux sur altérite ; Fonctions de pédotransfert de Footprint appliquées aux caractéristiques de sol déterminées par Van Den Bogaert (2011b)).

Dans le cas de l'étude précédente, le découpage spatial considéré pour CMF correspondait à celui pris dans CATHY en surface, et nous avons pu montrer que dans le benchmark, ce découpage conduisait à une réponse cohérente dans CMF pour la genèse du ruissellement. Toutefois, Hydrus2D adopte une discrétisation horizontale beaucoup plus fine. Nous avons donc voulu tester l'influence de la discrétisation horizontale suivant la longueur dans CMF. Les variables de sortie pour évaluer la réponse de CMF par rapport à Hydrus 2D sur le versant sont les flux de subsurface, les profils d'humidité et les bilans d'eau.

II.4.2. Présentation du cas d'étude de versant

Le versant est composé d'une parcelle connectée à un cours d'eau. La parcelle est de dimensions 200 m x 80 m (donc une superficie de 16000 m²) et le profil de sol a 2 m de profondeur. Le domaine est défini, dans Hydrus2D, comme étant un rectangle dans un plan vertical (XZ) de 200 m x 2 m. La géométrie choisie est basée sur un maillage défini par « 2D-General », où la discrétisation est réalisée en éléments triangulaires, avec un coefficient TS = 100 cm (*Targeted FE size*, qui est la taille moyenne des éléments triangulaires générés par la discrétisation en éléments finis). La discrétisation peut être affinée par zone dans Hydrus2D : nous avons donc raffiné le maillage sur les interfaces spécifiques aux conditions aux limites, telles que l'interface aux conditions atmosphériques et l'interface aval (surface de suintement et condition de charge constante). Le maillage considéré dans CMF correspond à des mailles rectangulaires, dont on teste plusieurs découpages. La discrétisation verticale correspond à 1 cm dans CMF.

Le modèle de van Genuchten–Mualem (1980) a été choisi dans les deux modèles hydrologiques pour décrire la rétention de l'eau dans le sol. Les caractéristiques hydrodynamiques des deux sols, homogènes, sont données dans le *Tableau 8*. Le choix d'un sol homogène est guidé comme précédemment par la volonté de contrôler les paramètres influents pour être capable d'analyser le comportement du modèle. De même, on utilise un forçage climatique simple, sous forme de créneau, correspondant à une pluie de 2 mm/h pendant 11

h à partir de 24 h du début de la simulation. La durée de la simulation est de 80 jours avec un pas de temps de 20 min dans CMF, vu que un pas de temps fin n'avait pas beaucoup d'effet sur la réponse du versant en subsurface ainsi que pouvoir gérer les sorties pour une période aussi longue de simulation. Le pas de temps pris en compte dans Hydrus2D est 30 min. Dans le cas de ces simulations, nous ne présentons pas le ruissellement, donc les seules fonctions utilisées sont *MatrixInfiltration* et *Richards* pour l'infiltration et *Richards_lateral* pour les écoulements latéraux.

Tableau 8 : Caractéristiques hydrodynamiques des sols.

Sol	K_{sat} (mm/h)	n	α (cm^{-1})	θ_{sat} (mm^3/mm^3)	θ_r (mm^3/mm^3)
Sol limoneux-sableux	41,66	1,5	0,01	0,4	0,01
Sol Morcille	141,4	1,27	0,1	0,44	0,037

II.4.3. Résultats et discussions

L'objectif à terme étant d'utiliser la représentation modulaire de CMF pour coupler des éléments indépendants du paysage (un élément vaudrait une maille), et non de refaire un modèle de type Hydrus ou Cathy, on fait le choix de tester le découpage avec ce modèle mais en le gardant simplificateur par rapport à un maillage classique. De fait, aucun découpage n'est considéré suivant la largeur du versant. En revanche, plusieurs tests sur la discrétisation horizontale dans le sens de la longueur ont été menés, comme des « sous-parcelles » : découpage en 5 éléments, 10 éléments et 20 éléments.

Remarque préalable:

Dans cette section, nous ne détaillerons pas les problèmes (ou bugs) rencontrés avec CMF comme dans la section précédente sur le benchmark. Cependant, il semble important de préciser au moins quelques difficultés que nous avons rencontrées, afin d'aider un futur utilisateur de CMF :

- Pour la représentation de la connexion avec le cours d'eau : la fonction responsable de cette connexion permet de préciser la profondeur sur laquelle la connexion peut être établie entre les couches de la maille la plus en aval et le cours d'eau. Suite à de nombreuses simulations, nous avons pu mieux identifier le fonctionnement de cette fonction. Il dépend de la profondeur du réservoir « Outlet », qui représente l'exutoire. Cette profondeur permet de considérer la partie où la surface de suintement est appliquée et la partie où une charge est imposée, ce qui n'est pas très explicité dans le Wiki.
- Pour les flux latéraux : plusieurs tests ont été menés sur les fonctions représentant pour représenter les flux subsurfaciques que ce soit entre les différentes mailles ou entre la maille en bas de versant et le cours d'eau. Les résultats ont permis d'identifier la fonction la plus adaptée et qui prend en considération le gradient hydraulique dans les couches du sol ainsi que avec l'exutoire et qui est *Richards_lateral*. En effet, parmi les fonctions existantes, il faut éviter d'utiliser *Darcy_Kinematic*

car elle représente la connexion avec la rivière en bas de versant en faisant un obstacle de flux nul.

Sol limoneux-sableux

Les conditions initiales sont données dans CMF en spécifiant la profondeur de la première couche saturée à 1 m de la surface en considérant un équilibre hydrostatique. De la même manière, l'état initial du profil du sol dans Hydrus2D est défini par une distribution linéaire du potentiel matriciel entre [-100 cm, 100 cm] sur tout le profil du sol. Les conditions atmosphériques sont appliquées à la surface du domaine d'étude dans CMF et Hydrus2D. Un flux nul est considéré à la frontière amont et en bas de profil. A la frontière avale, on applique dans les deux modèles une surface de suintement à la partie au-dessus de la nappe [0, 100 cm] et une charge constante en dessous (*Figure 31*).

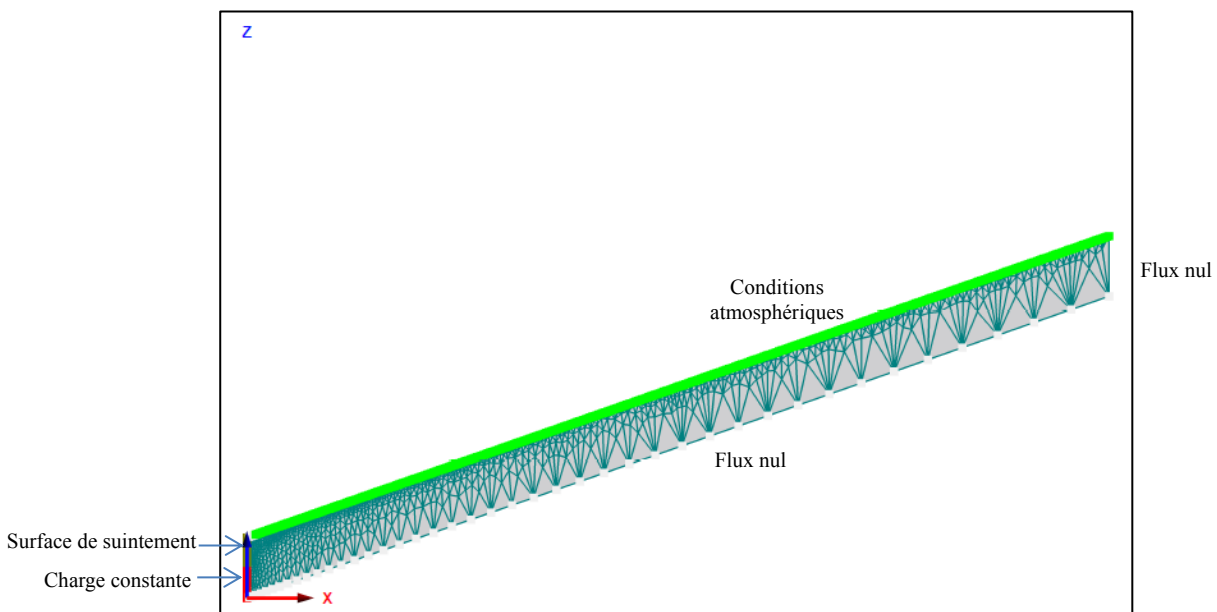


Figure 31 : Schéma des conditions aux limites et du maillage de versant dans Hydrus2D.

La *Figure 32* représente le flux infiltré en surface du versant dans les deux modèles Hydrus2D et CMF, pour différentes résolutions en surface de CMF : 5, 10 et 20 mailles. On constate que l'infiltration est similaire quel que soit le nombre de mailles. Quant aux flux à l'exutoire du versant, ils sont représentés dans la *Figure 33* jusqu'à 30 jours de simulation pour mieux voir la synchronisation entre le débit et la pluie considérée (la décrue après 30 jours étant régulière). Le flux de subsurface est similaire dans le cas de découpage à 20 mailles, mais présente un comportement un peu différent : tout d'abord un pic un peu supérieur au moment de la pluie par rapport à Hydrus2D, puis une décrue plus rapide dans CMF. Le débit à l'exutoire est sous-estimé par rapport à Hydrus2D pour les discrétisations grossières en surface (5 mailles et 10 mailles), tandis que la décrue est plus lente.

On compare dans les *Figure 34*, *Figure 35* et *Figure 36* les profils d'humidité et de pression en 3 points du versant dont le découpage est mené suivant 20 mailles. Les profils choisis sont : la maille (2) en bas de versant, la maille (10) en milieu du versant et la maille (19) en amont, et ce à quatre temps différents,

au début de la simulation (t_0), au début de la pluie (24 h), à la fin de la pluie (34 h), pendant la décrue (400 h) et à la fin de la décrue (t_f). Nous avons épargné la comparaison des deux mailles, celles en amont et la deuxième en aval du versant dans CMF, en vue d'éviter les effets de bord qui peuvent être différents dans les deux modèles à cause de la formalisation des conditions limites. Les profils d'humidité et de pression sont assez proches pour les deux modèles. Par ailleurs, nous remarquons un ressuyage plus important par Hydrus2D par rapport à CMF, notamment en haut du versant.

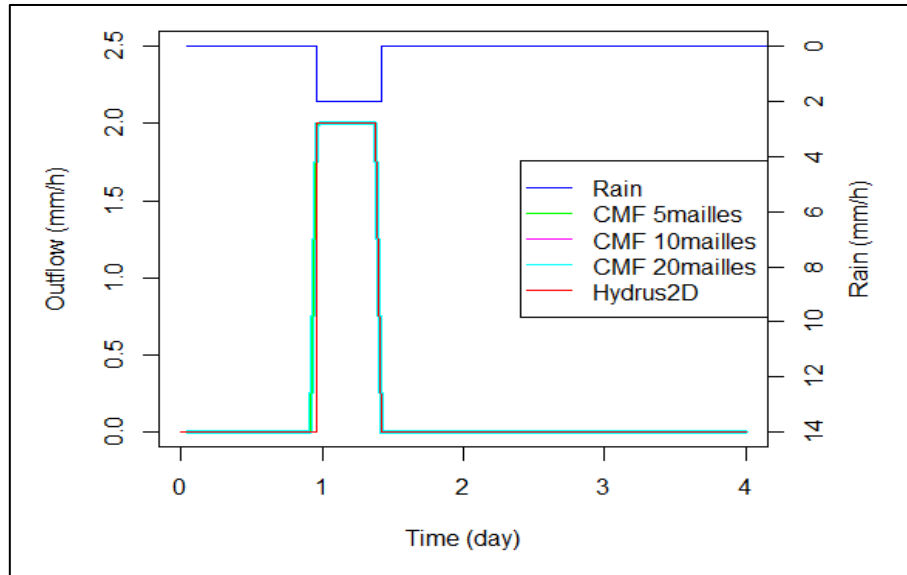


Figure 32 : Infiltration sur la surface du versant dans CMF et Hydrus2D pour différentes résolutions en surface de CMF.

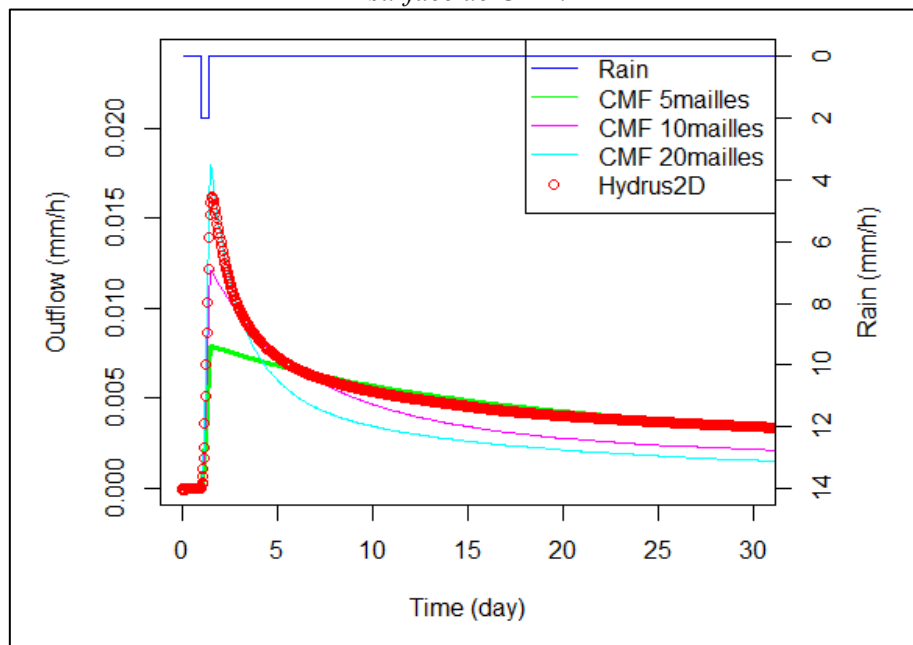


Figure 33 : Flux de subsurface à l'exutoire du versant dans CMF et Hydrus2D pour différentes résolutions en surface de CMF.

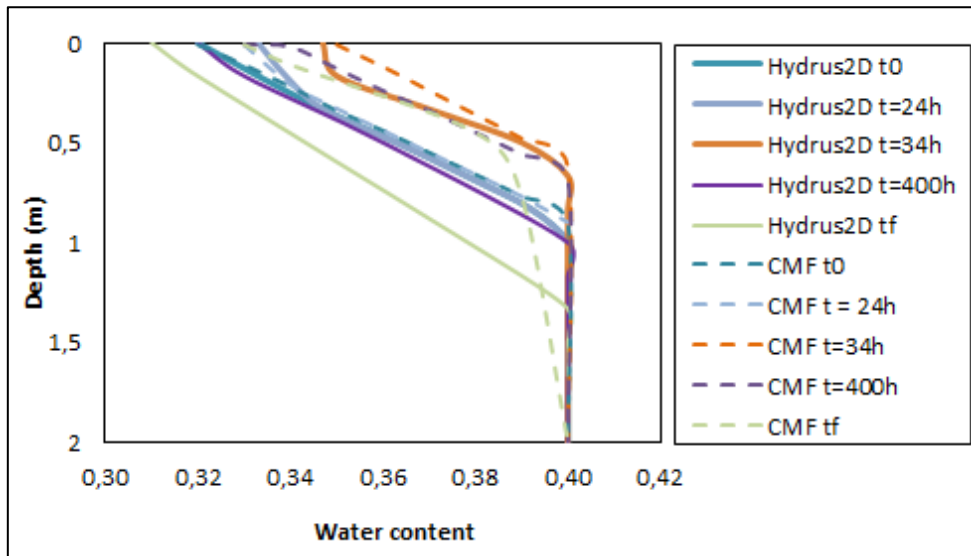


Figure 34 : Profils d'humidité d'un profil en bas du versant dans CMF et Hydrus2D.

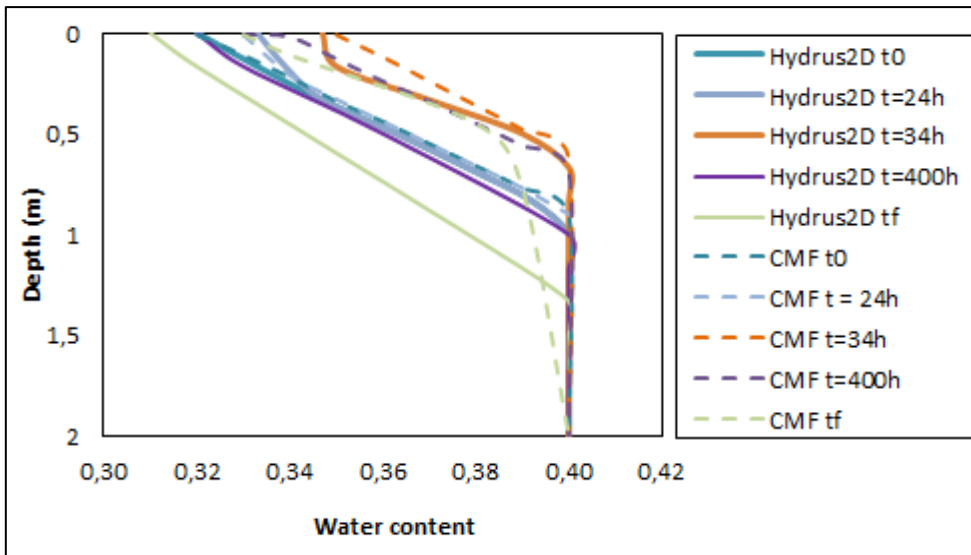


Figure 35 : Profils d'humidité d'un profil au milieu du versant dans CMF et Hydrus2D.

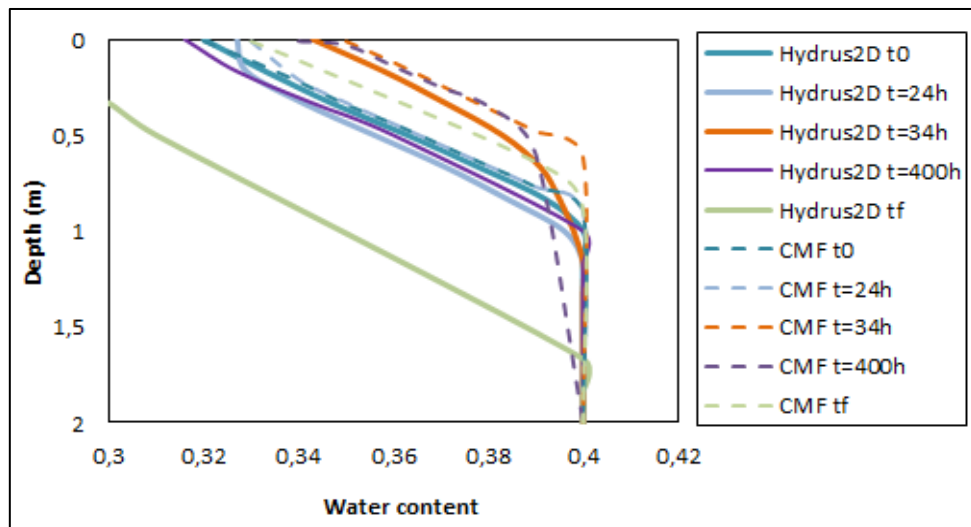


Figure 36 : Profils d'humidité d'un profil en haut du versant dans CMF et Hydrus2D.

Les bilans d'eau sont présentés dans le *Tableau 9*, où ils ont été évalué à la fin de la simulation (120 jrs) ; nous remarquons que l'erreur est faible, notamment dans le cas de la discrétisation à 20 mailles. Par ailleurs, le bilan est bouclé dans Hydrus2D et il est de 0,01%.

Tableau 9 : Bilans d'eau des simulations CMF

Simulations	Erreur (%)
5 mailles	0,25 %
10 mailles	0,19 %
20 mailles	0,13 %

Sol homogène proche de celui de la Morcille

Nous avons testé les mêmes simulations pour un sol inspiré de celui de la Morcille (voir *Tableau 8*), afin de juger si les mêmes conclusions s'appliquent quant à la discrétisation et à la similarité des résultats entre Hydrus2D et CMF. Lors de ces simulations, la nappe est considérée à 50 cm de la surface dans les deux modèles avec un équilibre hydrostatique à l'état initial. Un flux nul est considéré à la frontière amont et en bas de profil. A la frontière avale, on applique dans les deux modèles une surface de suintement à la partie au-dessus de la nappe [0, 50 cm] de la surface et une charge constante en dessous.

Les résultats présentés dans la *Figure 37*, montrent que la réponse de CMF à des flux de subsurface à l'exutoire est comparable à celle de Hydrus2D en dynamique de montée et de pic, mais le débit est sous-estimé, en pic et en décru. Plus le découpage est fin, plus on se rapproche d'une réponse comparable à celle de Hydrus2D pour ce qui concerne le débit de pointe. La *Figure 38* illustre les profils d'humidité d'un profil du sol en haut du versant à différents temps, avant la pluie et à la fin de la pluie (1 h et 34 h) ainsi qu'à $t = 600$ h en vue de voir le ressuyage du versant. Les profils sont similaires au début de la simulation avant l'application de la pluie, mais à la fin de la pluie, on remarque un petit décalage entre les deux modèles dans les couches de surface. De même que pour le sol précédent, ceci peut être expliqué par un transfert plus progressif dans Hydrus, grâce à la discrétisation fine adoptée, alors qu'il est rapide dans CMF de par la discrétisation que l'on a fixée à 20 mailles. On remarque également un ressuyage important dans Hydrus2D qui peut être dû à la discrétisation spatiale ainsi qu'à la différence entre les deux modèles dans conceptualisation et la mise en place des conditions aux limites.

Le *Tableau 10* montre que l'erreur sur les bilans de CMF est importante surtout dans le cas des discrétisations grossières, où l'on atteint 2,56 %. Pour Hydrus2D, les bilans sont bons (0,012 %). Le pas temps minimum considéré dans Hydrus2D est de 1 min, le pas de temps maximum était de 60 min, tandis que, le pas temps initial est de 10^{-5} min. Si l'on considère Hydrus2D comme la référence, le débit est sous-estimé dans CMF et le raffinement du pas de temps n'a pas permis d'obtenir une réponse meilleure. La condition à la limite avale du versant dans CMF, influence peut être les transferts latéraux dans les sols sableux vue qu'elle est simplifiée et différente de ce qui est considéré réellement dans Hydrus2D.

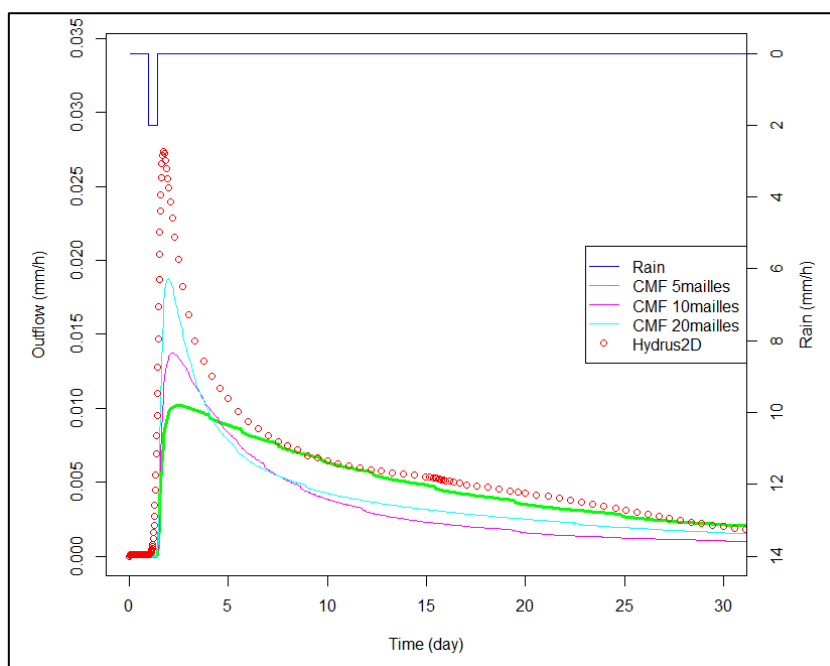


Figure 37 : Hydrogramme de flux de subsurface à l'exutoire.

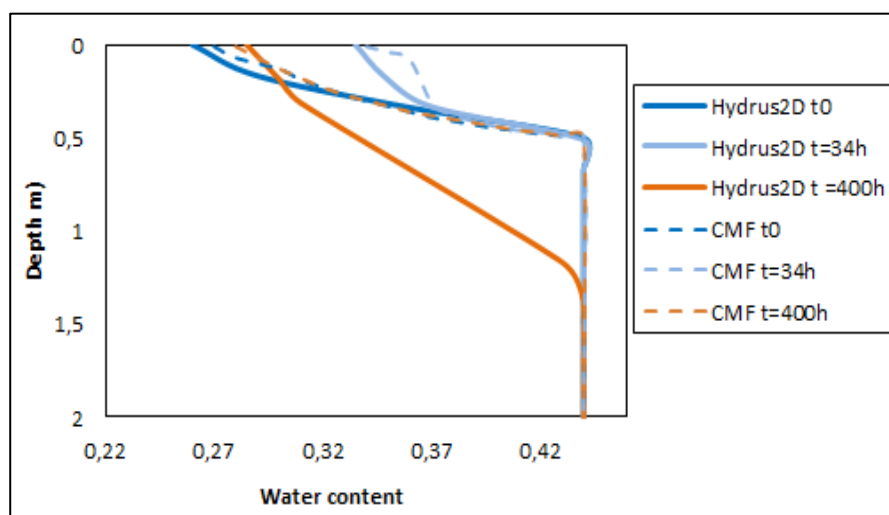


Figure 38 : Teneur en eau un profil en amont du versant dans CMF (20 mailles) et Hydrus2D.

Tableau 10 : Bilans d'eau des simulations CMF

Simulations	Erreur (%)
5 URH	2,56 %
10 URH	2,19 %
20 URH	1,69 %

Ces résultats donnent donc une différence non négligeable par rapport à Hydrus2D, bien qu'étant sur un sol homogène, et contrairement au sol précédent moins perméable (moins sableux). L'infiltration dans la première couche de sol est régie dans CMF par la fonction *MatrixInfiltration*, qui utilise dans la formule de Richards la moyenne géométrique entre les conductivités de la surface du sol et le premier horizon de sol pour l'estimation de la conductivité hydraulique à saturation. Dans le cas d'un sol sableux sec comme dans

cette simulation, cela conduit à des conductivités très faibles à la surface, et à une progression du front d'humidité particulièrement lente. Par conséquent, nous avons choisi de modifier CMF en adoptant la moyenne harmonique au lieu de la moyenne géométrique dans la fonction de *Richards*. Cette version est restée expérimentale, donc nous n'avons pas effectué une mise à jour du numéro de la version sur notre branche SVN.

II.4.5. Nouvelle version CMF avec la moyenne harmonique

Dans cette section, on modélise le même scénario avec le sol homogène de la Morcille ainsi que le sol limoneux-argileux précédent pour s'assurer que l'amélioration attendue dans la réponse hydrologique de la plateforme CMF dans le cas des sols sableux n'engendre pas de dégradation de sa réponse pour d'autres sols. La discrétisation spatiale considérée dans cette section est la plus fine testée précédemment, soit 20 mailles. Nous adoptons les mêmes conditions aux limites que celles présentées.

Sol homogène proche de celui de la Morcille

Les résultats montrés dans la *Figure 39*, montrent une amélioration significative de la réponse hydrologique de CMF en flux de subsurface à l'exutoire, avec une sous-estimation ramenée à 13,9% du pic du débit par rapport à Hydrus2D. Nous remarquons également une amélioration des bilans d'eau avec cette nouvelle version de CMF par rapport à la précédente (*Tableau II*). Cependant, la dynamique de ressuyage est très fortement ralentie dans cette nouvelle version, allant jusqu'à 120 jours pour CMF contre seulement 60 pour Hydrus, et contre 80 pour la version précédente de CMF. Ceci est peut être dû à la moyenne harmonique adoptée dans CMF qui retarde le transfert vertical et génère par conséquent, un retard dans les transferts latéraux observés en bas du profil.

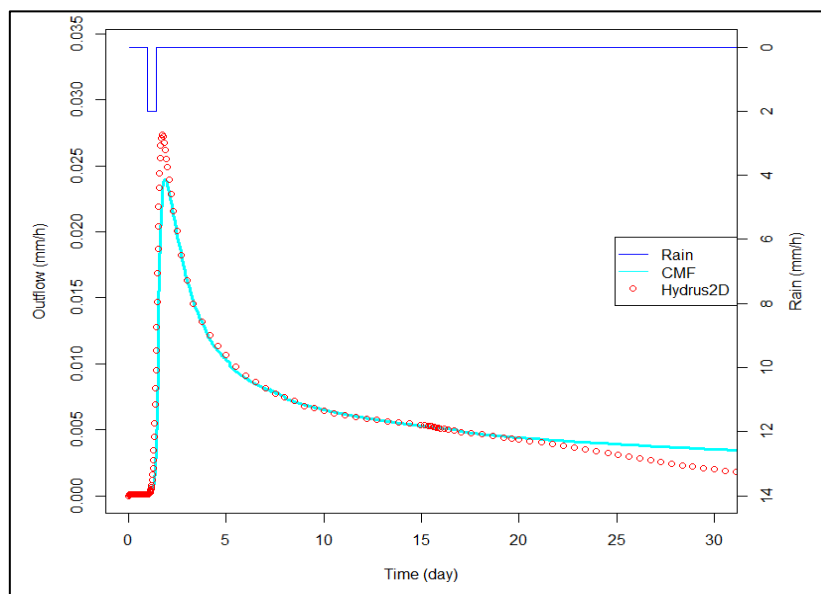


Figure 39 : Hydrogramme du flux de subsurface à l'exutoire du versant en sol homogène de la Morcille.

Tableau 11 : Erreur sur les bilans d'eau dans CMF.

Simulations	Version de CMF		Hydrus2D
	CMF-0.967	Har-mean	
Erreur (%)	1,69 %	1,4 %	0,13 %

Sol limoneux-argileux

Afin de vérifier que l'amélioration apportée dans le cas des sols sableux ne dégrade pas la réponse de CMF pour d'autres sols, nous avons également comparé CMF avec Hydrus2D pour le versant présenté dans la section (II.4.2.a) dont le sol pris en compte est limoneux-argileux. À l'état initial, la nappe est prise à 0,5 m de la surface lors de cette simulation. Les caractéristiques hydrodynamiques du sol sont ($K_{sat} = 3,33 \text{ mm/h}$, $\alpha = 0,019 \text{ cm}^{-1}$, $n = 1,34$, $\theta_s = 0,4 \text{ mm}^3 \text{ mm}^{-3}$). Le découpage spatial est mené dans CMF suivant 20 mailles.

Les flux de subsurface à l'exutoire sur le sol limoneux-argileux montrent une sous-estimation importante par la nouvelle version de CMF par rapport à Hydrus2D, avec un rapport de 35% entre les deux pics : l'erreur sur les bilans d'eau est 1,84%, ce qui est beaucoup important en comparant avec Hydrus2D, qui est de l'ordre de 0,132 %, ainsi la dynamique n'est pas très stable dans CMF (Figure 40).

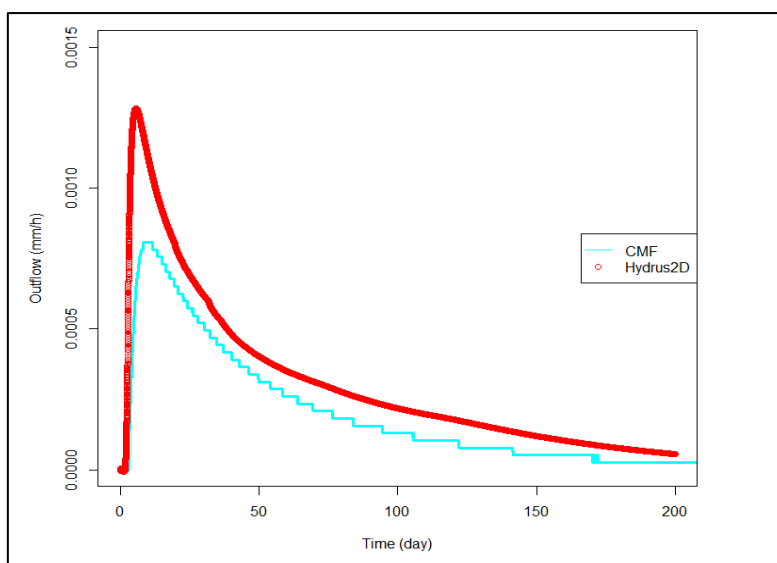


Figure 40 : Hydrogramme du flux de subsurface à l'exutoire du versant ayant un sol homogène limoneux-argileux.

II.4.6. Conclusion de la comparaison de la nouvelle version de CMF avec Hydrus2D

Cette dernière partie a été consacrée à la modélisation d'un versant proche de la Morcille en proposant une adaptation du calcul de la conductivité en surface dans CMF pour l'équation de Richards. Les résultats ont montré une amélioration dans la réponse de CMF dans le cas du sol homogène sableux de la Morcille. En revanche, l'application de cette nouvelle version de CMF sur un sol limoneux-argileux entraîne une importante sous-estimation du débit de subsurface à l'exutoire du versant, ainsi qu'une oscillation de l'hydrogramme qui est probablement due aux difficultés de convergence de la solution numérique dans ce cas. On peut conclure que la plateforme de modélisation CMF semble performante pour la modélisation de l'ensemble des processus advenant le devenir de l'eau à l'échelle d'un versant. Toutefois pour les sols sableux comme ceux de la Morcille, une approche spécifique semble nécessaire. Cette conclusion devrait toutefois être élargie en testant d'autres forçages climatiques, mais également sur des gammes de sol plus variées, en allant jusqu'à des sols non homogènes, qu'il s'agisse de leur développement de profil ou de la pédoséquence sur le versant.

Conclusion

Ce chapitre rapporte la prise en main de CMF et sa confrontation à d'autres modèles. Cette étape nous a permis d'approfondir nos connaissances sur la plateforme, de corriger certains dysfonctionnements (ou bugs), et d'introduire plusieurs améliorations. La comparaison de la réponse de CMF au benchmark a conduit au développement d'une nouvelle fonction du ruissellement, qui a été validée lors des différents tests de la genèse du ruissellement effectués. D'autres modifications ont été introduites dans le code source de la plateforme CMF, telles que l'équilibre hydrostatique à l'état initial, ou une représentation isotrope de la conductivité hydraulique. Ceci a impliqué la compilation de plusieurs versions de CMF et la reproduction des scénarios tests du benchmark, et a représenté un travail long nécessitant beaucoup d'efforts, mais qui était indispensable pour le développement de nouveaux modules au sein de la plateforme.

D'autres améliorations ont été apportées au fil du temps pour améliorer la réponse de CMF dans des cas spécifiques, notamment dans le cas du ruissellement par excès de saturation avec une nappe à 1 m, avec une infiltration en surface prescrite à la conductivité hydraulique à saturation. Suite aux modifications substantielles apportées au code de la plateforme, les résultats obtenus montrent que les discrétisations fines et adaptative conduisent à des réponses de CMF comparables à celles de Cathy. Toutefois, la comparaison avec le benchmark ne nous a pas permis d'apporter une validation plus fine de ce qui se passe dans le sol. En effet, on ne disposait pas des sorties en pression et en humidité dans les sorties fournies par Mauro Sulis.

Pour explorer la représentation que fait CMF des écoulements de subsurface, nous avons poursuivi avec Hydrus2D, qui n'a pas pu être utilisé pour le ruissellement, car il ne simule pas explicitement celui-ci, mais plutôt une sorte d'accumulation en surface. Cette deuxième phase de comparaison s'est focalisée sur l'infiltration, le transfert en subsurface et les échanges à la limite aval du versant. Comme dans le cas de Cathy, les simulations avec Hydrus2D ont nécessité des pas de temps très fins et une discrétisation spatiale fine également. En comparaison, le découpage spatial de CMF en surface est relativement grossier, et le pas de temps plus grand, car ce dernier n'a pas un effet significatif sur la réponse hydrologique. Ceci garantit un coût de calcul moins important et peut être un avantage non négligeable en pratique.

L'étude de comparaison de CMF avec Hydrus, en 1D d'abord sur un scénario d'infiltration, puis sur un modèle 2D de versant sur un scénario de transfert de subsurface, a permis d'aboutir à des résultats satisfaisants dans le cas d'un sol sableux-limoneux. En revanche, nous avons mis en évidence une sous-estimation du débit dans CMF dans le cas d'un sol sableux. Les modifications que nous avons testées pour tenter d'améliorer la réponse de CMF, en remplaçant dans la résolution de l'équation de Richards la moyenne géométrique des conductivités par la moyenne harmonique ont permis d'obtenir des résultats comparables à ceux simulés avec Hydrus2D. Cependant, cette nouvelle version de CMF, qui paraît adaptée au sol sableux, n'a pas donné les résultats souhaités dans le cas des sols plutôt argileux. Par ailleurs, la représentation simplifiée adoptée dans CMF de la condition à la limite en bas du versant pourra générer des différences entre Hydrus2D et CMF, notamment en termes de transfert de subsurface et des échanges avec le cours d'eau à l'exutoire.

Nous n'avons pas abordé la modélisation de transfert hydrique dans les versants ayant des sols hétérogènes afin d'être capable d'analyser sur des cas simples les problèmes de CMF qui se sont avérés importants. La confrontation du comportement de CMF par rapport à celui d'autres modèles sur des sols hétérogènes serait pourtant intéressante à tester en augmentant le degré de complexité petit à petit. Enfin, une perspective importante de ce chapitre de prise en main et validation de la réponse hydrologique de CMF serait de valider les simulations contre des données expérimentales.

La partie hydrologie de versant déjà existante dans CMF étant stabilisée à la suite de cet ensemble important de tests, il est maintenant possible d'y ajouter les processus qui dominent le devenir de l'eau et des pesticides à l'échelle d'un versant. Les transferts préférentiels jouant un rôle crucial dans les sols structurés (Beven and Germann, 1982; Villholth *et al.*, 2000; Jarvis, 2007), le prochain chapitre se propose de décrire le développement d'un modèle à double perméabilité au sein de la plateforme hydrologique CMF.

Chapitre III : Développement d'un modèle à double perméabilité

Chapitre III : Développement d'un modèle à double perméabilité

Introduction

Parmi les processus intervenant dans l'infiltration et le transport des solutés, le rôle des écoulements préférentiels liés aux macropores est reconnu depuis les années 80-90 (Beven and Germann, 1982; Barbash, 1996). La présence d'écoulements préférentiels est due principalement à la présence à la fois de grands pores, de fissures, de canaux radicalaires ainsi qu'à l'hétérogénéité de la texture, qui engendre une non-uniformité du front d'humectation (Hendrickx, 1993). D'autre part, la formation des chemins d'écoulement en raison de la présence de la pente dans les couches du sol permet une redirection du débit d'eau vers des profondeurs aussi importante d'une manière aussi rapide sans laisser à l'eau dans le sol le temps de s'équilibrer. Dans les dernières décennies, des études sur les problèmes de qualité de l'eau ont mis en avant que des quantités significatives de contaminants réactifs étaient retrouvées très rapidement après application dans les drains, les eaux souterraines ou les rivières (Barbash and Resek, 1996; Thorsen *et al.*, 1998; Christiansen *et al.*, 2004). Cette rapidité de transfert ne pouvait s'expliquer que par la présence d'écoulements préférentiels liés aux macropores dans les sols (Flury, 1996; Reichenberger *et al.*, 2002a). En effet, même en étant adsorbés sur des particules très fines, il était difficile de comprendre comment ces particules pouvaient suivre un chemin d'écoulement continu sans être filtrées au moins en partie par la matrice du sol (Flury, 1996). Cette problématique, particulièrement importante dans les milieux agricoles, a alors suscité de nombreuses recherches abordant ce problème, dont la plupart sont citées dans Beven and Germann (2013). De plus, la mise sur le marché de produits dépend de l'évaluation par modélisation des risques de transferts dans le sol des substances. Les modèles classiques d'évaluation des risques utilisent généralement l'équation de Richards avec teneur en eau et pression moyennées. L'évaluation des risques de transfert doit donc absolument inclure les écoulements préférentiels, et ce sur une large variété de sols (Beven, 1991a; Beven and Germann, 2013). Le modèle Macro, utilisé pour l'homologation représente depuis son origine ce type d'écoulement, le modèle PEARL (Tiktak *et al.*, 2011) qui n'utilisait précédemment que l'équation de Richards a été récemment adapté pour les prendre également en compte.

Les écoulements préférentiels sont particulièrement importants dans le transfert des pesticides, et ils sont en même temps extrêmement difficiles à comprendre et quantifier, autant sur le terrain qu'en modélisation (Kohne *et al.*, 2009a). C'est pourquoi je propose, en introduction du chapitre de modélisation des transferts préférentiels, un récapitulatif de vocabulaire et un bref historique des études menées dans ce domaine.

III.1.1. Démarche du chapitre

La démarche du chapitre est la suivante : au vu de l'évidence de l'importance du rôle des écoulements préférentiels dans le transfert des pesticides à l'échelle d'un versant, il nous a semblé important dans cette thèse de les représenter au sein de la plateforme de modélisation CMF. J'aborde tout d'abord un aperçu des différentes approches de conceptualisation du sol, et les approches mathématiques à considérer pour décrire les flux dans chaque compartiment, ainsi que les échanges possibles entre les différentes zones. Une comparaison entre quelques modèles types à double perméabilité, tels que Macro (Jarvis, 1994b, 1998), RZWQM (Ahuja, 1992), Hydrus2D (Simunek *et al.*, 1999; Simunek and van Genuchten, 2008), nous a permis de choisir l'approche de double perméabilité à développer au sein de la plateforme de modélisation CMF, en prenant en compte les contraintes de calcul et de développement dans CMF. On présente ensuite les choix faits concrètement et la mise en place dans la plateforme. Notre modèle se base sur les fonctions décrivant les flux dans la matrice déjà testées et validées dans le chapitre précédent. Une nouvelle fonction d'infiltration en surface de macropores a été développée. Deux fonctions alternatives de transfert des macropores vers la matrice ont été développées : la première s'exprime en fonction de la différence de la saturation entre les deux régions porales matrice et macropores (Philip, 1968). Par ailleurs, la deuxième fonction est basée sur la théorie présentée par Gerke and van Genuchten (1993b) et qui a été implémentée dans le modèle Macro. Elle représente une approximation du premier ordre de l'équation de diffusion.

Le modèle ainsi développé est appliqué d'abord sur des profils 1D, puis sur un versant 2D, et comparé avec Hydrus1D et Hydrus2D respectivement, en y adoptant l'approche de double perméabilité et en s'attachant à simuler des expériences permettant la comparaison entre les modèles. Un récapitulatif des simulations menées est donné dans le *Tableau 12*. Dans ce chapitre, on ne simule que l'eau, le transfert des substances dans ce cadre de double perméabilité sera présenté dans le chapitre suivant.

Tableau 12 : Récapitulatif des simulations menées dans le chapitre 3.

Partie	Processus visé	Type modélisation	Cas d'étude	Modèle de comparaison
Partie (III.6.1)	Infiltration	1D	Sol limoneux	Hydrus1D
	Transfert Macro-Micro		CLS ¹³ : Flux constant	
Partie (III.6.2)	Infiltration	1D	Sol-types	Hydrus1D
	Transfert Macro-Micro		CLS : Flux constant	
Partie (III.6.3)	Infiltration	1D	Sol sableux-limoneux	Hydrus1D
	Transfert Macro-Micro		CLS : Conditions atmosphériques	
Partie (II.4)	Flux subsurfacique	2D - versant	Sol sableux-limoneux	Hydrus2D
			CLS : Conditions atmosphériques	

III.1.2. Définitions concernant le flux préférentiel

Un sol en pédologie est un objet naturel, continu et tridimensionnel. Il est formé des constituants minéraux et organiques présents à l'état solide, liquide et gazeux (Baize, 2013). Un milieu poreux est l'ensemble de grains solides ou d'agrégats autour desquels existent des espaces vides appelés pores, qui peuvent être interconnectés ou non (Vauclin, 1994). Je présente dans ce qui suit quelques définitions importantes concernant la structure du sol et les écoulements préférentiels.

Structure du sol

Le mot **structure** désigne tout arrangement relatif de composants, à toutes échelles d'espace et à tous niveaux d'investigation, des constituants solides des couvertures pédologiques, qu'ils soient sous forme de grains seuls, de massifs ou d'agrégats, entre lesquels subsistent des vides (Foucault and Raoult, 2001). La structure du sol contient aussi les espaces vides, qui se remplissent d'eau ou de gaz (Gerke, 2006). Ces espaces comprennent les espaces inter-agrégats (espace de fissures et macropores) où règnent les mouvements rapides et les intra-agrégats (les micropores) où règnent les mouvements lents, comme illustré dans la *Figure 41*. L'utilisation des termes macropores, micropores, mésopores et écoulements préférentiels n'est pas vraiment normalisée dans la littérature scientifique. Nous abordons dans ce qui suit une définition de ces termes pour éviter toute ambiguïté, tout en évoquant quelques citations données dans la littérature.

¹³ CLS : conditions à la limite de surface

Macroporosité

Les macropores représentent l'espace de dominance des écoulements préférentiels où ne s'exercent pas significativement les forces de capillarité. La macroporosité est donc le milieu à travers lequel l'eau et les produits dissous peuvent contourner la plupart du volume du sol d'une manière largement imprévisible (Beven and Germann, 1982). Les voies préférentielles ont été principalement identifiées comme des grands espaces poreux du sol (Ehlers, 1975), des canaux racinaires (Derhold and Nordmeyer, 1995; Zehe and Flüher, 2001), fissures et fractures reliées entre elles en réseau (Hamdi *et al.*, 1994; Sidle *et al.*, 1998a) ou des fissures se développant en sols gonflants (Luwmoore, 1981).

Beven and Germann (1982) ont proposé une classification des macropores suivant le diamètre équivalent. Le seuil est estimé dans certains cas à 15 μm (Marshall and Holmes, 1979), dans d'autres à 100 μm (Luwmoore, 1981). Par ailleurs, Jarvis (2007) suggère un diamètre cylindrique équivalent de 0,3 mm, en se basant sur des données expérimentales. Les systèmes de macropores peuvent également inclure des conduits de diamètre considérablement plus petit que la taille minimale ci-dessus. Ceux-ci peuvent agir comme des conduits, à condition qu'ils se positionnent nettement dans la direction générale de l'écoulement. Germann (2010) Beven (1991b), Skopp (1981) et Bouma (1981) ont souligné que la continuité des pores et la tortuosité, et non pas seulement la taille des pores, contrôlaient le transfert par les macropores, et que leur fonctionnalité est basée sur les caractéristiques de transport et la conductivité hydraulique (Jarvis, 2007). En modélisation, la géométrie des pores peut être considérée comme cylindrique ou plane, afin de simplifier la description du mouvement dans la macroporosité. Dans ce qui suit, j'appelle macropores tous les voies préférentielles définies précédemment.

Microporosité / Mésoporosité

La microporosité, appelée également matrice du sol, représente la fraction du sol qui contient les pores de petite taille où dominent les forces de capillarité (Luwmoore, 1981). La matrice du sol est un système complexe composé d'agrégats et de particules de taille plus ou moins faible et de formes différentes. L'eau est retenue dans ce système sol par des forces qui dépendent du diamètre et de la forme des pores. La relation entre la force de rétention et le taux d'humidité du sol est généralement exprimée par la courbe de rétention. La matrice du sol peut être subdivisée en un ou plusieurs compartiments en distinguant la microporosité et la mésoporosité.

III.2. Bref état de l'art des recherches sur les écoulements préférentiels

Mise en évidence des écoulements préférentiels par expérimentation

A partir des années 1970, des études expérimentales des flux au non-équilibre dans les macropores et de leurs effets sur le transfert des solutés ont mis en évidence ce processus (Thomas and Phillips, 1979). On ne

propose pas ici un état de l'art exhaustif des expérimentations, qui sont nombreuses, mais Beven and Germann (2013), par exemple, en proposent une synthèse : la plupart des études expérimentales pour comprendre le transfert préférentiel ont lieu à l'échelle de la colonne de sol, et dans des conditions parfaitement contrôlées.

Lorsque l'on passe à l'échelle de la parcelle, de nombreuses complexités s'ajoutent : hétérogénéité des propriétés du sol, qui sont difficiles à identifier depuis la surface du sol, forte sensibilité des macropores au travail du sol, et difficulté à contrôler l'ensemble du site et déterminer clairement ce que l'on peut attribuer ou non aux chemins préférentiels (Beven and Germann, 2013). Par ailleurs, le transfert préférentiel à travers les macropores a été considéré comme essentiel pour décrire le devenir de l'eau et des solutés dans les sols drainés (Villholth and Jensen, 1998; Villholth *et al.*, 1998). Ces études ont souligné l'importance de prendre en compte la variabilité spatiale des paramètres hydrodynamiques. Enfin, à l'échelle du versant, outre une géologie *a priori* encore plus complexe, s'ajoute la difficulté de distinguer les écoulements préférentiels verticaux des écoulements de subsurface (latéraux). Des études expérimentales menées sur des versants au sol argileux ont montré que le transfert rapide d'un traceur vers les eaux souterraines (de 4 à 7m de profondeur) ne peut être expliqué que par le mécanisme des écoulements préférentiels (Sidle *et al.*, 1998b; Nielsen and Wendroth, 2003). D'autre part, de nombreux travaux soulignent le rôle crucial que jouent les macropores dans le fonctionnement global du versant, et concluent à un réel besoin de continuer les expérimentations pour avancer à cette échelle (Chappell, 2010; Jones, 2010).

Théorie des écoulements préférentiels et modélisation : historique

La première description des processus impliqués dans les écoulements préférentiels a été donnée par Beven and Germann (1982), qui ont proposé une approche d'onde cinématique pour la description des mouvements préférentiels entraînés par la force de gravité. D'un point de vue théorique, beaucoup de nouvelles questions ont été abordées par Beven and Germann (2013), parmi lesquelles : la façon dont l'eau s'écoule à travers les macropores, l'interaction de l'eau des macropores avec l'eau de la matrice, l'importance jouée par les macropores en terme de participation aux flux d'eau arrivant en bas de versant ou à l'exutoire d'un bassin versant, et surtout l'implication des transferts macroporeux sur les flux des substances ou les interactions chimiques dans le sol. Kirkby (1985) avait déjà montré l'importance des flux des macropores à l'échelle d'un versant. White (1985) a regardé de plus près les macropores du point de vue de la pédologie et de l'agronomie.

Beven and Germann (2013) ont présenté une révision de leur étude en 1982, en expliquant que l'intérêt de la prise en compte des flux dans les macropores n'a pas diminué en modélisation (Kladivko *et al.*, 2001; Zehe and Flüher, 2001; Reichenberger *et al.*, 2002b; Beven, 2006). En effet, même si la majorité des modèles en hydrologie dans le sol reste fidèle à l'équation de Richards pour représenter le transfert de l'eau dans le sol, on a pu constater depuis les années 90 une très forte augmentation du nombre d'études qui tentent d'aller « au-delà » de Richards en essayant de prendre en compte les écoulements préférentiels dans les sols. D'après Beven and Germann (2013), cet accroissement d'intérêt provient en particulier du constat à

cette époque que l'équation de Richards, appliquée à des cas concrets sur des sites agricoles, ne permettait pas d'expliquer pourquoi des solutés qui étaient censés être fortement adsorbés sur les particules de sol en surface ou proche-surface se retrouvaient tout de même à des profondeurs importantes, compte tenu des données d'observation de qualité de l'eau de nappes souterraines et de drains agricoles. À la suite d'une conférence ASABE dédiée à cette problématique, on pouvait donc espérer un certain élan de développement de modèles des écoulements préférentiels à l'échelle de parcelles, versants et bassins versants pour des applications liées aux pratiques agricoles (Gish and Shirmohammadi, 1991). Cependant, on constate 20 ans plus tard que finalement, la plupart des modèles appliqués à ces échelles utilisent majoritairement une représentation basée sur Richards-Darcy dans des sols non saturés, et ce pour des raisons diverses : capacités de calcul augmentant et permettant de résoudre Richards sur de grands sites à échelle fine, modèles reconnus internationalement ayant gardé ce choix, en interprétant l'écart aux observations par une mauvaise paramétrisation de Richards. Le rôle des écoulements préférentiels dans un sol naturel structuré a été largement ignoré en modélisation également parce que sa description nécessite une représentation précise de l'écoulement au non-équilibre (Jarvis, 2007).

III.3. Approches de la Modélisation des domaines à écoulements préférentiels : les différentes approches

Une variété d'approches possibles a été abordée dans la littérature pour la modélisation des écoulements préférentiels. Elles ont parfois été mises en œuvre concrètement dans des modèles, et correspondent à plusieurs approches de conceptualisation des sols (Beven and Germann, 1982; Gerke and van Genuchten, 1993a; Simunek *et al.*, 2003; Gerke, 2006; Kohne *et al.*, 2009a). Je présente dans ce qui suit un récapitulatif de ces approches, qui couvrent les concepts de simple porosité, double porosité et double perméabilité.

III.3.1. Modèle à simple porosité (SPM)

Cette conceptualisation consiste à considérer le sol comme constitué d'une seule région avec des propriétés continues. La description macroscopique du mouvement de l'eau et des solutés dans le sol est généralement donnée par l'équation de Richards pour les milieux poreux variablement saturés pour l'eau et par l'équation de convection-dispersion pour le transport des substances (Gerke, 2006), données dans ce qui suit pour un modèle 1D :

$$C \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial h}{\partial z} - K \right) \quad (\text{III.1})$$

$$\frac{\partial(\theta R c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial c}{\partial z} - q c \right)$$

Où, C [L^{-1}] est la capacité d'eau du sol, θ [L^3L^{-3}] est la teneur volumétrique en eau, h [L] est le potentiel matriciel de l'eau dans le sol, t [T] est le temps, z [L] est la distance depuis la surface, K [LT^{-1}] est la conductivité hydraulique, c [ML^{-3}] est la concentration de soluté dans le sol, R est le facteur de retard des

solutés, $D [L^2T^{-1}]$ est le coefficient de dispersion effective et $q [LT^{-1}]$ est la densité volumétrique du flux.

L'approche de simple porosité peut représenter également les écoulements dans le cas d'un non-équilibre physique, comme le montre l'exemple présenté par Ross and Smettem (2000). Ceux-ci considèrent que la teneur en eau effective peut parfois différer considérablement de celle donnée par la courbe de rétention à l'équilibre, en particulier lors d'un écoulement rapide ; l'équilibre peut ainsi être atteint un peu plus lentement dans le temps. Par ailleurs, d'autres approches basées sur le non-équilibre physique ou le non-équilibre chimique (avec des sites à cinétique instantanée, et d'autres à cinétique plus lente) peuvent également être représentées via un couple d'équations comme l'équation (III.1). Bien que cette approche permette de représenter une augmentation significative de la conductivité hydraulique proche de la saturation, elle ne permet pas la représentation des écoulements préférentiels. En adoptant une approche uniforme du front d'humectation, ce type de modèle ne pourra pas prédire les transferts rapides à travers les macropores qui contournent un transfert lent dans la matrice.

III.3.2. Modèle à double porosité

L'approche à double porosité a été proposée initialement pour étudier l'exploitation des eaux souterraines et des réservoirs pétroliers fissurés (Barenblatt *et al.*, 1960; Duguid and Lee, 1977). L'approche se base sur un couplage des écoulements rapides dans le milieu fracturé, hautement conducteur, et d'une matrice où l'eau est supposée stagner : le seul transfert qui y est considéré est plutôt un échange entre les deux régions porales (*Figure 42*).

L'approche à double porosité considère parfois plusieurs compartiments dans la matrice elle-même, dont certains favorisent un transfert lent et d'autres pas de transfert. Ce type de conceptualisation correspond à une approche MIM (notion eau mobile / eau immobile) (Warren et Root, 1963; Manteaux et Smith, 1964). Cette approche a été étendue aux sols structurés (van Genuchten and Wierenga, 1976; Gaudet *et al.*, 1977) pour décrire le transport de soluté dans les sols ayant plusieurs types de transfert.

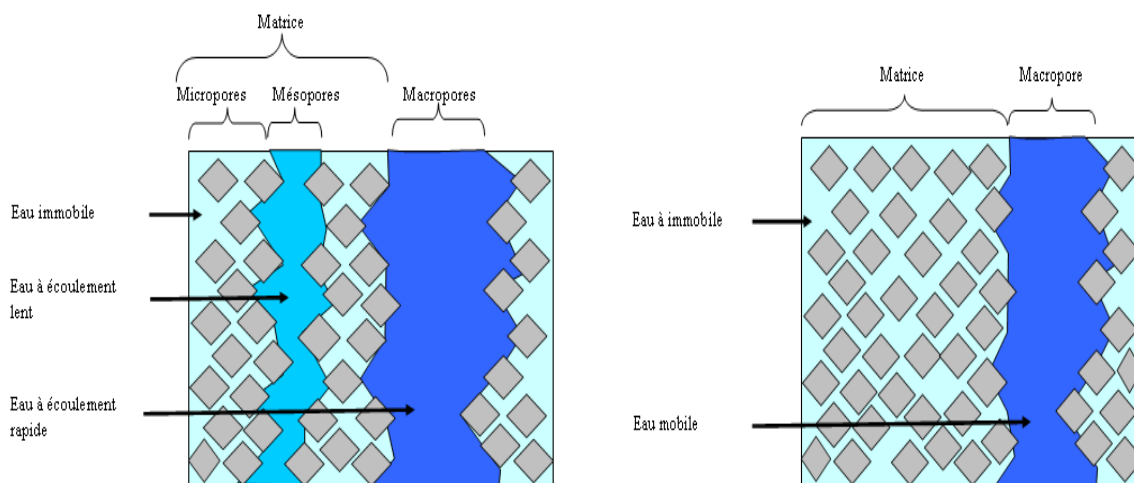


Figure 42 : Schéma simplifié d'un modèle à double porosité (gauche) et un modèle DP-MIM (droite).

Les modèles de transport MIM basés sur la géométrie ont été appliqués avec succès à l'échelle du laboratoire (Nkedi-Kizza *et al.*, 1982) ou pour des études de terrain (Maloszewski and Zuber, 1985; Goltz and Roberts, 1986). Notons que l'application de cette approche, dans des modèles hydrologiques, ne permet une solution analytique que pour des géométries simples.

III.3.3. Modèle à double perméabilité

L'approche de double perméabilité est utilisée pour représenter un système à double porosité permettant un écoulement dans les deux domaines poreux (inter-agrégats et intra-agrégats), caractérisés par des conductivités différentes : le transfert dans un des domaines est lent tandis qu'il est rapide dans l'autre. Cette approche est désormais la plus populaire. Les modèles à double perméabilité existants diffèrent principalement dans la façon dont ils représentent le transfert en eau et en substances dans chaque région porale ainsi que les échanges entre les deux compartiments (*Figure 43*). Plusieurs modèles adoptant cette approche appliquent des équations similaires pour décrire l'écoulement dans les régions de fractures et la matrice, tel Hydrus, qui adopte l'approche de Gerke and van Genuchten (1993b, 1996) et applique les équations de Richards à chacune des deux régions porales. D'autres modèles utilisent des formulations différentes pour décrire le mouvement dans les deux régions porales tel que RZWQM (Ahuja, 1992; Ahuja *et al.*, 2000) ou Macro (Jarvis, 1994b; Jarvis, 2007), qui seront décrits plus en détail dans la section suivante.

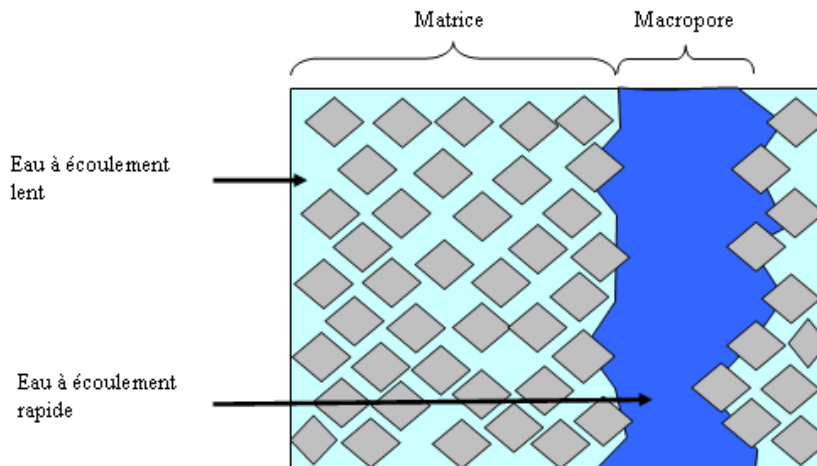


Figure 43: Schéma simplifié d'un modèle à double perméabilité (BRGM, 2004).

L'approche proposée par Germann and Beven (1981) pour la représentation de la genèse des flux préférentiels consiste à considérer que l'infiltration dans les macropores peut être déclenchée lorsque le taux d'infiltration de la première couche de la matrice est inférieur à l'apport d'eau à la surface du sol. Une approche représentant le concept de la redistribution de l'eau dans le sol macroporeux est présenté dans la *Figure 44* et se base sur le principe que l'infiltration dans les macropores ne se déclenche qu'à la saturation des premiers horizons de la matrice (Germann *et al.*, 1986).

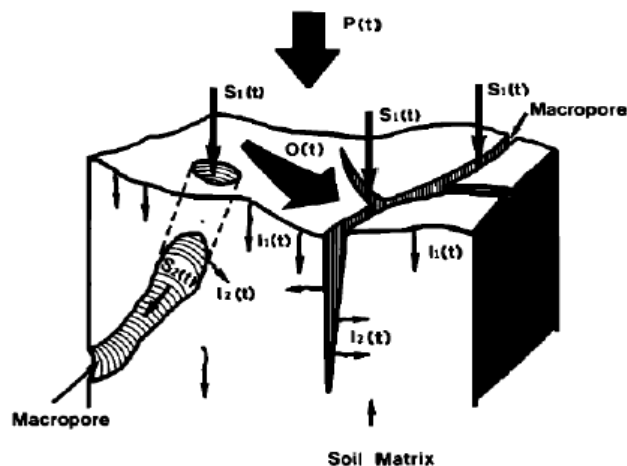


Figure 44 : Illustration des écoulements dans les macropores (Germann and Beven, 1981).

III.3.4. Conclusion

La présentation précédente n'est pas exhaustive, et il existe évidemment d'autres approches pour prendre en compte les transferts préférentiels dans certains types de sol, en considérant plusieurs compartiments. Les modèles à multiples porosités ou perméabilités sont conceptuellement similaires aux modèles à double porosité/perméabilité, mais considèrent des compartiments du sol supplémentaires. Cela permet une plus grande flexibilité, mais implique également de définir un nombre supplémentaire de paramètres pour caractériser chaque compartiment du sol et décrire les différents échanges à considérer (Simunek *et al.*, 2003).

Les modèles à double perméabilité nous semblent les plus appropriés pour la représentation des écoulements préférentiels et des transferts réactifs dans les sols structurés dans le cadre de cette thèse. En effet, dans certains sols sableux, la prise en compte des transferts à travers la matrice couplée aux macropores est indispensable pour mieux représenter le devenir des pesticides. C'est par exemple le cas des sols du bassin de la Morcille, comme le montre la caractérisation hydrodynamique des sols effectuée par (Van Den Bogaert, 2011a). Afin de mieux appréhender les représentations mathématiques déjà adoptées dans d'autres modèles, nous avons choisi de présenter de façon plus détaillée dans la section suivante 3 modèles très connus et d'usage répandu pour représenter les transferts rapides à travers les macropores et les fractures suivant une approche à double perméabilité.

III.4. Comparaison de trois modèles à double perméabilité

Les modèles que nous avons choisis comme exemples pour mieux comprendre les approches adoptées et choisir celle qui nous semble la plus adaptée pour l'intégrer dans CMF sont : Macro (Jarvis *et al.*, 1997), Hydrus 2D (Šimunek *et al.*, 2006b) et RZWQM (Ahuja *et al.*, 2000). Il existe d'autres approches et modèles possibles ; cependant, il nous semble que ces trois modèles couvrent les théories les plus utilisées et les plus validées, de l'échelle du laboratoire à l'échelle de la parcelle, voire parfois des versants. De plus ce sont les

modèles les plus utilisés dans la littérature.

III.4.1. MACRO

MACRO est un modèle 1D à double perméabilité décrivant le transport de l'eau, de la chaleur et des solutés dans les milieux stratifiés variablement saturés, développé par Jarvis (1994a). Il considère deux domaines d'écoulement de porosités différentes : les micropores et les macropores, ce qui permet de représenter les transferts préférentiels (Jarvis, 1994a; Larsbo and Jarvis, 2003, 2005). L'écoulement vertical dans la matrice est régi par l'équation de Richards tandis que le mouvement dans les macropores est entraîné par la force gravitaire suivant une onde cinématique (Beven and Germann, 1982). La limite entre les deux domaines est définie par le potentiel matriciel ψ_b (θ_b, K_b), qui représente le potentiel où la matrice du sol est saturée (voir la *Figure 45*). Ainsi, la teneur en eau volumique θ_b correspond à la saturation fictive des micropores. A la saturation de la matrice, l'infiltration dans les macropores s'active jusqu'à la saturation de ces derniers. Une sursaturation de la matrice (θ_s^*) pourra se produire pendant un pas de temps pour permettre un transfert des macropores vers la matrice en favorisant une petite désaturation des macropores au pas de temps suivant. Ce transfert se fait numériquement en basculant le surplus des macropores dans la matrice et la sursaturation est considérée sur un seul pas de temps.

La rétention dans la matrice est donnée avec la formule de van Genuchten (1980), comme suit :

$$S = \frac{\theta_{mi} - \theta_r}{\theta_s^* - \theta_r} = \left(1 + (\alpha_{vg} \Psi)^{n_{vg}} \right)^{-m_{vg}} \quad (\text{III.2})$$

Où, S [$L^3 L^{-3}$] est la teneur en eau effective de la matrice ; n_{vg} et m_{vg} sont les paramètres de van Genuchten ; θ_r [$L^3 L^{-3}$] est la teneur en eau résiduelle ; θ_s^* [$L^3 L^{-3}$] est la teneur en eau à la saturation fictive donnée pour une pression dans la matrice inférieure (en valeur absolue) à Ψ_b .

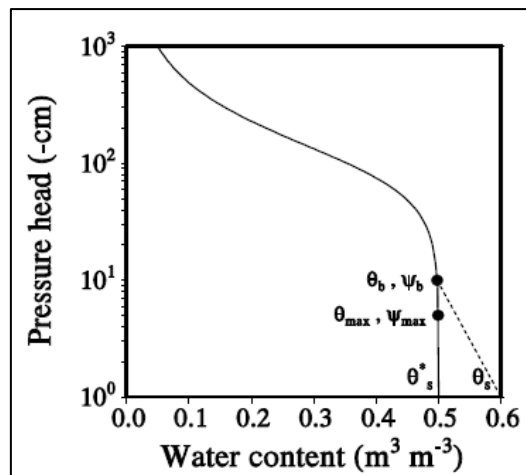


Figure 45 : Courbe de rétention d'eau dans Macro (Larsbo and Jarvis, 2003).

Le mouvement dans la matrice est régi dans MACRO par le biais de l'équation de Richards, donnée par :

$$C \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} + 1 \right) \right) - \sum S_i \quad (\text{III.3})$$

Où, $C = \frac{\partial \theta}{\partial \Psi}$ [L^{-1}] est la capacité en humidité du sol ; θ [L^3L^{-3}] est la teneur volumétrique de la matrice ; Ψ [L] est le potentiel matriciel ; t [T] est le temps ; z [L] est la profondeur ; S_i [T^{-1}] est le terme source/puits utilisé pour représenter le drainage, la rétention de l'eau par les plantes et les échanges entre la matrice et les macropores. Il est positif dans le cas d'un transfert des macropores vers la matrice. K [LT^{-1}] est la conductivité hydraulique de la matrice, estimée comme suit :

$$K_{mi} = K_b \left(\frac{s}{S_{mi}(\theta_b)} \right)^l \left[\frac{\left(1 - (1 - s^{1/mvg})^{mvg} \right)}{\left(1 - (1 - S_{mi}^{1/mvg})^{mvg} \right)} \right]^2 \quad (\text{III.4})$$

Où, l est le facteur de tortuosité des micropores ; et $S_{mi}(\theta_b)$ est la saturation de la matrice à la teneur en eau θ_b .

Le modèle MACRO adopte l'équation d'onde cinématique pour décrire un mouvement gravitaire dans les macropores, comme suit :

$$\frac{\partial \theta_{ma}}{\partial t} = \frac{\partial K_{ma}}{\partial z} - \sum S_i \quad (\text{III.5})$$

Où, θ_{ma} [L^3L^{-3}] et K_{ma} [LT^{-1}] sont la teneur en eau et la conductivité hydraulique, respectivement, des macropores. La conductivité hydraulique des macropores est donnée en fonction de θ_{ma} , comme suit :

$$K_{ma} = K_{s(ma)} S_{ma}^{n^*} \quad (\text{III.6})$$

Où, n^* représente un exposant cinématique représentant la distribution de la taille des macropores et leur tortuosité et S_{ma} est la saturation dans les macropores, exprimée par : $S_{ma} = \theta_{ma} / e_{ma}$, où e_{ma} [L^3L^{-3}] est la macroporosité, égale à $(\theta_s - \theta_b)$.

Le modèle d'échange d'eau entre les macropores et les micropores est basé sur l'approche présentée par Gerke and van Genuchten (1993b), il est donné par :

$$Q_{mp} = \frac{G_f D_w \gamma_w}{d^2} (\theta_b - \theta_{mx}) V_{layer} \quad (\text{III.7})$$

Où, V_{layer} est le volume du réservoir des macropores ; θ_{mi} est la teneur en eau des micropores ; d est la longueur du trajet de la diffusion effective, qui est fonction de la taille des agrégats et de l'influence des revêtements sur les macropores et la surface des agrégats, D_w est la diffusivité effective de l'eau, G_f est un facteur de géométrie (pris égal à 3 pour une géométrie de fissure rectangulaire, van Genuchten, 1985 ; Gerke et van Genuchten, 1996) et γ_w est un facteur d'échelle introduit pour faire correspondre la solution approchée et la solution exacte au problème de la diffusion (van Genuchten, 1985 ; Gerke and van Genuchten, 1993b ; Jarvis, 1994a), pris égal à 0,4. La diffusivité est donnée comme suit :

$$D_w = \left(\frac{D_{\theta b} - D_{\theta mi}}{2} \right) S_{ma} \quad (III.8)$$

Où, $D_{\theta b}$ et $D_{\theta mi}$ sont la diffusivité de l'eau à la teneur en eau des micropores à saturation et à la teneur en eau actuelle des micropores, respectivement, et S_{ma} est introduite pour tenir compte de la zone de contact mouillée entre la matrice du sol et les macropores.

$D_{\theta mi}$ est donné par l'équation de van Genuchten (1980), comme suit :

$$D_{\theta mi} = \left[\frac{(1-m_{vg})K_s^*}{\alpha_{vg} m_{vg} (\theta_s^* - \theta_r)} \right] S \left[(1 - S^{1/m_{vg}})^{-m_{vg}} + (1 - S^{1/m_{vg}})^{m_{vg}} - 2 \right] \quad (III.9)$$

Où, S [$L^3 L^{-3}$] est la saturation de la matrice ; K_s^* est la conductivité hydraulique fictive à saturation obtenue par l'extrapolation de la fonction de la conductivité des micropores à un potentiel de pression de zéro, comme suit :

$$K_s^* = K_b \left(\frac{1}{S_{mi(\theta_b)}} \right)^l \left(1 - (1 - S^{1/m_{vg}})^{m_{vg}} \right)^{-2} \quad (III.10)$$

$D_{\theta b}$ est donné par la valeur de S dans l'équation (III.9) égale à $S_{(\theta b)}$.

Le transport de solutés dans Macro est régi par l'équation de convection-dispersion dans la matrice, avec un terme de source/puits, qui englobe une large gamme de processus, y compris le flux d'échange entre les deux compartiments du sol, la cinétique de sorption, l'absorption par les cultures, la biodégradation et les pertes par le lessivage latéral vers les drains et la nappe locale. Une approche équivalente a été utilisée pour la simulation du transport de solutés dans les macropores, si ce n'est que la dispersion est négligée, et que seul un équilibre de sorption est considéré. Les échanges en termes de solutés entre les deux domaines poraux sont exprimés dans MACRO par une diffusion.

Le modèle MACRO est utilisé pour l'homologation, et il a été utilisé pour les sols drainés. Il y manque toutefois la représentation de la battance, et du labour/non labour (Tsoukis and Tournemaine, 2008). L'adoption de l'approche de l'onde cinématique pour la description des mouvements préférentiels paraît avantageuse compte tenu d'un nombre de paramètres réduit. Cependant, cette approche a l'inconvénient de ne pas permettre de représenter les flux ascendants dans la macroporosité (Simunek *et al.*, 2001).

III.4.2. Root Zone Water Quality Model (RZWQM)

Root Zone Water Quality Model est un modèle 1D à double perméabilité, dont la première version a été développée en 1992 par l'USDA-ARS (Ahuja, 1992; Malone *et al.*, 2004). Le modèle intègre des processus physiques, chimiques et biologiques permettant la simulation de la croissance des plantes et du mouvement de l'eau, des nutriments et des pesticides dans les eaux de ruissellement et de percolation, ainsi que les effets des pratiques agricoles sur l'environnement. Il est constitué de six modules ou sous-systèmes permettant la simulation de la croissance de la végétation, du mouvement de l'eau, des nutriments et des pesticides à travers la zone racinaire (Ahuja *et al.*, 2000). RZWQM adopte une description DP-MIM pour la simulation des mouvements de l'eau et des solutés dans un profil vertical du sol. Trois régions de transport sont

supposées exister dans le sol : les macropores, la matrice du sol où l'eau est mobile (mésopores), et la matrice du sol où l'eau est immobile (micropores). L'horizon de surface du sol est considéré avoir des macropores de forme cylindrique, et dans les horizons inférieurs, ces derniers prennent la forme de fissures planes. Le domaine des macropores est supposé être continu, vertical, et bien dispersé dans la matrice du sol. La continuité des macropores est prolongée jusqu'à l'écoulement souterrain. Cependant, une certaine proportion de macropores est supposée s'arrêter (dead end) dans chaque horizon du sol (Ahuja *et al.*, 2000).

L'infiltration de l'eau dans la matrice est simulée par l'équation de Green-Ampt (Ahuja *et al.*, 1995) en surface, puis la redistribution de l'eau dans le sol est décrite par l'équation de Richards. L'excès de pluie ou de ruissellement est acheminé vers les macropores à la surface et régi par la loi de Poiseuille, en supposant que l'écoulement y est piloté par la force de gravité. Le flux infiltré dans les macropores est soumis par la suite à une imbibition latérale dans la matrice du sol, en dessous du front d'humectation vertical (Malone *et al.*, 1999). La redistribution de l'eau dans le sol inclut l'évaporation à la surface et la transpiration des plantes, ainsi que le drainage (Johnsen *et al.*, 1995). Les échanges de solutés se produisent par un mélange entre la solution des macropores et celle de la matrice, et par une diffusion de premier ordre entre les deux régions de la matrice mobile et immobile (Malone *et al.*, 2001). La mobilisation des pesticides, que ce soit dans l'eau du sol ou dans le ruissellement peut être décrite soit par une sorption à l'équilibre instantané, soit par un modèle à deux sites, dans lesquels une partie des sites de sorption suit une cinétique du premier ordre (Ma *et al.*, 2007). La dégradation est simulée comme une cinétique de premier ordre.

L'approche adoptée dans RZWQM est très intéressante de point de vue de la conceptualisation des macropores et des connexions entre eux. Par contre, la considération de trois compartiments du sol nous semble plutôt compliquée vu que notre objectif est de développer un modèle à double perméabilité simplifié, et donc basé sur seulement deux compartiments du sol.

III.4.3. HYDRUS 2D

Le modèle Hydrus 2D inclut une variété d'approches, qui comprennent la simple porosité (SPM), la double porosité MIM, et la double perméabilité (DPM). Les deux approches MIM et DPM sont les plus fréquemment utilisées, et sont basées sur le modèle DUAL (Gerke and van Genuchten, 1993b). Les deux approches double porosité et double perméabilité dans Hydrus se basent sur deux compartiments du sol : i) l'eau qui circule dans les macropores et les fractures et ii) l'eau qui circule dans la matrice du sol. Les deux domaines poraux du sol sont représentés dans Hydrus 2D comme étant deux sols « côte à côte ». Chaque région porale est définie par une courbe de rétention et la teneur en eau volumique du sol « réel » est donnée par la somme des teneurs en eau de chaque région porale. Le tenseur d'anisotropie de conductivité hydraulique non saturée est donné en fonction de la conductivité hydraulique relative K_r et de la conductivité hydraulique à saturation, pour chaque domaine poral.

Dans le cas du module à double perméabilité, l'infiltration de l'eau dans chaque domaine poral est donnée dans Hydrus 2D par l'équation de Richards, comme suit :

$$C_f \frac{\partial h_f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_f \frac{\partial h_f}{\partial z} - K_f \right) - \frac{\Gamma_w}{w} \quad (\text{III.11})$$

$$C_m \frac{\partial h_m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_m \frac{\partial h_m}{\partial z} - K_m \right) - \frac{\Gamma_w}{1-w} \quad (\text{III.12})$$

Où, c_f et c_m [L^{-1}] sont les capacités d'eau spécifiques des macropores et de la matrice, respectivement, $d\theta/dh$, z [L] est la profondeur positive vers le bas, t [T] est le temps, et Γ_w [T^{-1}] est le taux de transfert d'eau des pores de l'inter-agrégat vers l'intra-agrégat, h_m et h_f sont la pression dans la matrice et les macropores, respectivement, w est la fraction du volume des macropores dans le volume total du sol.

Le transfert d'eau entre les macropores et la matrice est donné par une équation de diffusion de premier ordre. Le taux d'échange fracture-matrice est supposé proportionnel à la différence de potentiel de pression entre les deux espaces poreux, suivant l'approche proposée par (Gerke and van Genuchten, 1993b; Kohne *et al.*, 2009a). Cette approche propose un terme de transfert Γ_w en fonction du potentiel des deux régions porales, comme suit :

$$\Gamma_w = \alpha_w (h_f - h_m) \quad (\text{III.13})$$

Où, α_w [$L^{-1}T^{-1}$] est un coefficient de transfert de masse du premier ordre. Pour les milieux poreux avec des géométries bien définies, le coefficient de transfert de masse du premier ordre, α_w , peut être défini comme suit (Gerke et van Genuchten, 1993b) :

$$\alpha_w = \frac{\beta}{d^2} K_a \gamma_w \quad (\text{III.14})$$

Où, d [L] est la longueur de la diffusion effective (c'est la moitié de la largeur des agrégats ou la moitié du diamètre des macropores) ; β est un coefficient de géométrie ; γ_w est un coefficient d'échelle (= 0,4) ; et K_a [LT^{-1}] est la conductivité hydraulique effective de l'interface entre la matrice et les macropores donnée par la formule suivante :

$$K_a(h) = 0.5(K_f(h_f) + K_m(h_m)) \quad (\text{III.15})$$

Pour plus d'information sur ce module de double perméabilité, on pourra se référer au manuel du module DualPerm de Hydrus 2D/3D (Simunek et al., 2012).

Pour conclure, Hydrus 2D/3D représente l'avantage de permettre l'approche de double perméabilité à plusieurs dimensions. Ceci pourra représenter une bonne piste de comparaison avec le modèle développé dans CMF. Cependant, cette approche est relativement complexe en termes de conceptualisation, car elle considère deux sols séparés, avec des propriétés hydrodynamiques différentes et des flux simulés en vertical et en latéral dans chaque domaine poral. Il faut noter que la modélisation en double perméabilité avec Hydrus2D nécessite une discrétisation fine, à la fois du point de vue spatial et temporel car le modèle ne parvient souvent pas à converger vers une solution stable.

III.4.4. Synthèse

Le *Tableau 13* récapitule les conceptualisations et les équations adoptées dans chaque modèle pour la représentation des processus du transport d'eau et des solutés dans la matrice et les macropores. On peut conclure de cette étude de comparaison que la plupart des approches de double perméabilité pour l'écoulement et le transport dans les sols structurés sont conçues pour des applications unidimensionnelles. Le passage vers une description spatiale en deux dimensions implique la prise en compte de la variabilité spatiale des propriétés hydrauliques des domaines de porosité différentes (Vogel *et al.*, 2000).

Tableau 13 : Equations adoptées pour le devenir de l'eau et des pesticides dans les différents modèles MACRO, RZWQM et Hydrus2D-DP.

Transfert	MACRO	RZWQM	Hydrus 2D-DP ¹⁴
Eau – Macro	Onde cinématique	Loi Poiseuille	Richards
Eau – Matrice	Richards	Green-Ampt Richards	Richards
Soluté – Macro	Convection + sorption	Convection	Convection-Dispersion
Soluté – Matrice	Convection-Dispersion + cinétique de sorption	Convection + diffusion (méso, micro)	Convection-Dispersion Isotherme d'adsorption Cinétique de dégradation
Eau Macro – Matrice	Onde diffusante de 1 ordre	Adsorption latérale Macro-micro	Diffusion de 1 ^{er} ordre
Eau Matrice – Macro	Diffusion instantanée	/	Diffusion de 1 ^{er} ordre
Soluté Macro – Matrice	Convection-Diffusion	Mélange macro-micro	Convection-Diffusion
Soluté Matrice – Macro	Convection- Diffusion	Diffusion Micro-Méso	Convection-Diffusion 1 ^{er} ordre

Pour ce qui concerne le transfert entre les différentes régions porales, l'approche proposée par (Gerke and van Genuchten, 1993a) et qui est adoptée dans Hydrus nécessite six paramètres indispensables pour chaque espace poral (θ_{sf} , θ_{sm} , θ_{rf} , θ_{rm} , K_{sf} , K_{sm} , n_f , n_m , α_f , α_m), en plus des paramètres structurels pour la caractérisation de l'interface fracture-matrice (ω , β , γ , K_{as} , d , a). Au total, cette approche a besoin de 16 paramètres pour la description du mouvement d'eau dans le sol. Par ailleurs, elle est relativement complexe pour caractériser expérimentalement la rétention d'eau et la fonction de conductivité hydraulique pour chacune des deux régions porales, ou pour décrire l'interface fracture-matrice. Enfin, l'approche proposée par Beven and Germann (1982) paraît avantageuse puisqu'aucune des propriétés de rétention d'eau de la région macroporale n'est nécessaire, ce qui implique un nombre de paramètres plutôt réduit (Simunek *et al.*, 2003).

¹⁴ Le module DualPerm intègre les couplages avec l'ensemble des modèles usuels de transfert de masse dans Hydrus2D/3D tel que le modèle MIM, les isothermes non linéaires, les cinétiques de premier ordre.

Un inconvénient de cette approche est que l'équation d'onde cinématique ne représente que l'écoulement gravitaire : les forces capillaires sont négligées. Ainsi, d'après Simunek *et al.* (2003), l'application à des problèmes d'écoulement à deux dimensions (flux latéraux) peut engendrer des problèmes numériques et de conceptualisation. En ce qui concerne les échanges, plusieurs approches sont possibles selon que l'on se base sur une différence de pression ou de saturation entre les deux domaines. Cette brève revue bibliographique nous donne des éléments pour choisir la démarche à adopter pour inclure la représentation de la double perméabilité dans CMF.

III.5. Développement du module à double perméabilité dans CMF

Notre réflexion sur le nouveau modèle à double perméabilité (DP) a été discutée avec le développeur de la plateforme, qui a manifesté sa motivation pour un tel développement dans CMF. En parallèle à ma revue bibliographique et au choix des conceptualisations qu'on souhaitait adopter, P. Kraft a commencé à développer une structure à deux compartiments poraux dans CMF pour représenter la matrice et les macropores. Ainsi, dans le cadre d'un projet aux Philippines sur des sols gonflants (swelling soils), il a développé quelques fonctions d'infiltration dans les macropores, ainsi que d'échange entre les deux régions porales, pour modéliser des mouvements préférentiels. Toutefois, la plupart de ces fonctions n'étaient pas stables numériquement, et correspondaient parfois à une vision très simplifiée de la représentation physique des mouvements préférentiels.

Dans ce contexte, notre approche de modélisation à double perméabilité s'appuie sur les choix suivants :

- pour la matrice, nous utilisons les fonctions de CMF déjà testées dans le cadre de la modélisation à simple porosité, en adoptant les équations *MatrixInfiltration* à la surface et *Richards* pour l'infiltration dans la matrice sur la verticale et la fonction *Richards_lateral* pour les écoulements latéraux ;
- pour la modélisation des flux dans les macropores, nous avons choisi de développer une nouvelle fonction d'infiltration en surface dans les macropores *MacroporeInfiltration*. Par ailleurs, la percolation dans les macropores est menée à l'aide de la fonction *KinematicMacroFlow* développée par P. Kraft, qui se base sur une approche simplifiée ;
- pour les échanges entre les deux espaces poraux, nous avons choisi de représenter seulement les transferts des macropores vers la matrice. Nous avons développé deux fonctions alternatives d'échange matrice-macropores. La première fonction est proportionnelle à la différence des teneurs en eau entre les deux compartiments du sol (Philip, 1968). La deuxième est basée sur l'approche présentée par van Genuchten (1993) et représente une onde diffusante comme cela est implémenté dans le modèle Macro.

Par ailleurs, notre modèle à double perméabilité est en deux dimensions, ce qui représente une différence majeure avec Macro et ne permet pas une confrontation avec ce modèle. Nous avons donc choisi de poursuivre la démarche initiée dans le chapitre II, en comparant les résultats de CMF avec ceux d'Hydrus

1D, puis 2D, dans sa version double perméabilité. Comme CMF est basée sur une approche capacitive, où la variable dérivée est le volume, cette comparaison n'est pas triviale, notamment pour s'assurer que l'on représente des sols et systèmes équivalents avec les deux modèles, ce qui sera détaillé plus loin.

III.5.1. Comment construire le modèle DP dans CMF ?

La prise en compte des écoulements préférentiels dans la plateforme de modélisation hydrologique CMF est assurée par la création d'un nouveau réservoir représentant les macropores pour chaque couche du sol (SoilLayer). Par conséquent, le réservoir existant (SoilLayer) est considéré dans ce cas comme étant la matrice du sol. Le réservoir de macropores est un réservoir d'eau dont la classe hérite de la classe WaterStorage, et est appelé « MacroPore », à l'instar de la classe « SoilLayer ». La classe WaterStorage, hérite des trois classes 1 - StateVariable, qui représente la classe des variables qui sont fonction du temps (dérivée de dt), 2 - StateVariableOwner qui permet de regrouper plusieurs variables sous forme de vecteur suivant un ordre choisi, donnant l'état d'un sous-système à une temps donné et 3 - Flux_node qui représente la classe qui permet de connecter deux nœuds avec des flux.

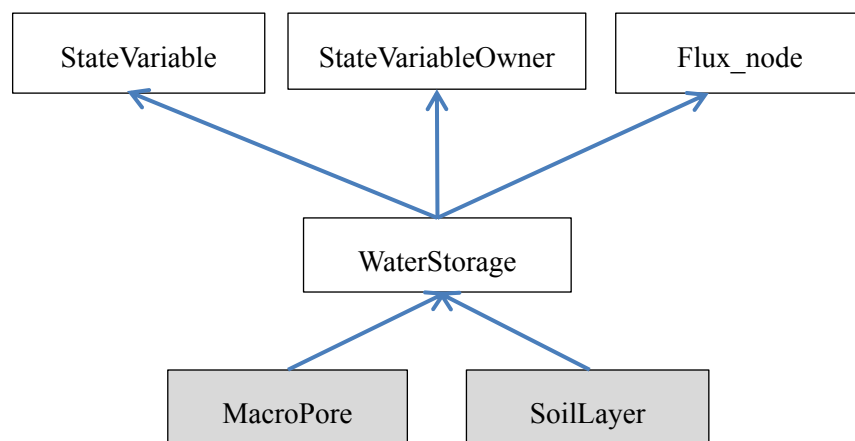


Figure 46 : Héritage des classes SoilLayer et MacroPore dans CMF.

La définition d'un réservoir de macropores dans une modélisation CMF demande d'abord de créer des couches du sol dans CMF, puis d'associer un réservoir macropore à chaque couche pédologique ou numérique. Les macropores sont caractérisés par leur densité (density [L]) qui est la moyenne de la distance entre les pores, leur conductivité hydraulique à saturation (K_{sat_mp} [LT^{-1}]) et le ratio de leur volume au le volume total de la couche du sol (porefraction). Dans le cas des sols gonflants, on pourra spécifier le porefraction_wilt, qui représente le degré de remplissage des macropores au point de flétrissement.

Le modèle à double perméabilité dans CMF consiste donc à définir pour chaque colonne et chaque couche du sol deux réservoirs « SoilLayer » et « MacroPore ». Le routage de flux se fait entre les couches de la matrice du sol suivant un modèle 1D pour l'infiltration (fonction de Richards) et 1D pour les flux latéraux (*Richards_lateral*, *Darcy*). Un modèle 1D vertical a été développé pour l'infiltration à la surface puis la percolation dans les macropores. Un modèle représentant les échanges entre les deux régions porales (Figure

47) a également été développé. Ces modèles sont présentés dans la suite. Le modèle à double perméabilité en deux dimensions dans CMF se base alors sur l'assemblage de plusieurs colonnes de sol, où le transfert latéral ne se produit qu'à travers la matrice.

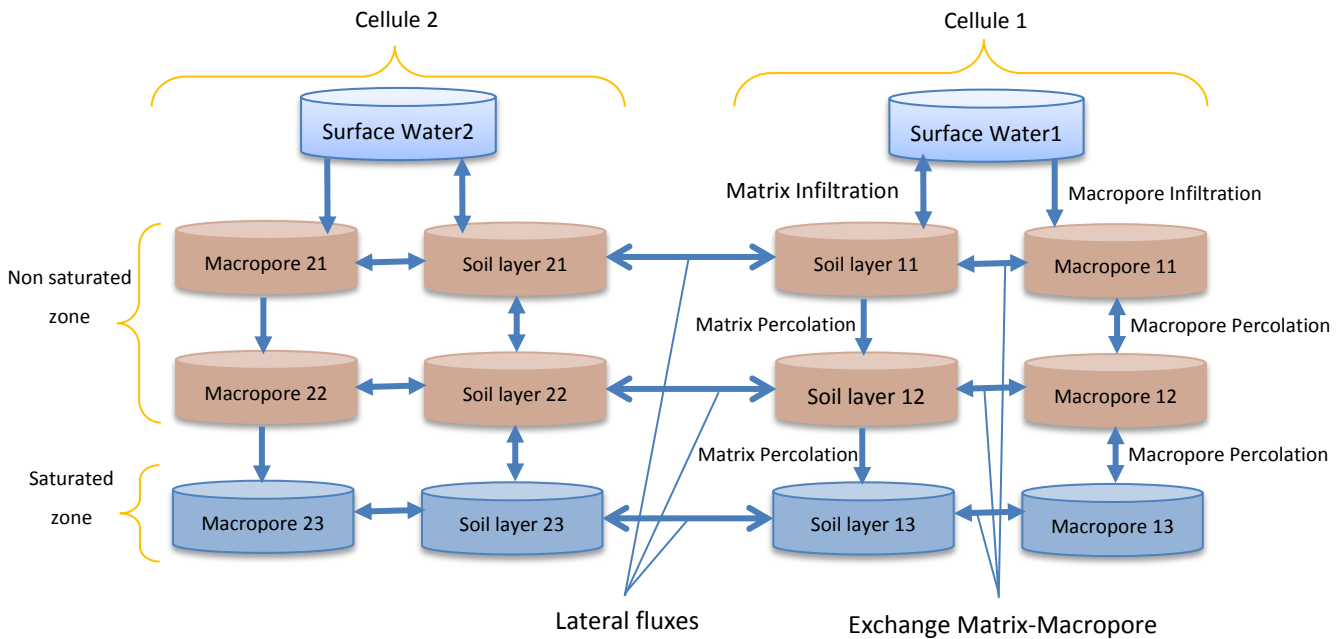


Figure 47 : Structure d'un modèle 2D à Double Perméabilité dans CMF.

III.5.2. Choix des fonctions à développer

Nous présentons ci-dessous les différentes fonctions développées, d'infiltration à la surface, dans le sol, et d'échange matrice-macropores puis les tests effectués, et les enseignements que l'on en tire sur cette version double perméabilité de CMF

III.5.2.1. Fonctions existantes

➤ Percolation dans les macropores

La percolation dans la matrice est régie par l'équation de Richards, comme déjà abordé dans le chapitre précédent. La percolation dans les macropores est calculée par une fonction préexistante dans CMF, nommée « *KinematicMacroFlow* ». C'est une fonction linéaire simplifiée, qui prend en compte le remplissage de chaque réservoir macropore, comme suit :

$$Q_{mp} = K_{mp} \frac{V_{upper}}{C_{upper}} \left(1 - \frac{V_{lower}}{C_{lower}} \right) A \quad (III.16)$$

Où, K_{mp} [LT^{-1}] est la conductivité hydraulique des macropores ; $V_{upper/lower}$ [L^3] est le volume effectif de l'eau stockée dans le réservoir de macropore source ou récepteur, respectivement ; C [L^3] est la capacité du réservoir de macropore et A [L^2] est l'aire de la couche.

➤ **Infiltration dans la matrice**

L'infiltration dans la matrice est menée par la fonction d'infiltration dans la matrice de sol et la fonction Richards pour l'infiltration entre les couches adjacentes sur la verticale.

➤ **Les transferts latéraux dans la matrice**

Les écoulements latéraux ne sont représentés que dans la matrice, par la fonction *Richards_lateral*, déjà validée dans le chapitre précédent. Ainsi, les macropores ne sont connectés entre eux que sur la verticale, les connexions latérales se limitant à la couche matricielle correspondante. Cette approche reste donc simplifiée : elle permet le transfert préférentiel vers les eaux profondes, puis les écoulements latéraux saturés dans la matrice.

III.5.2.2. Fonctions développées

a) **L'infiltration à la surface : MacroporeInfiltration**

➤ **Première approche testée**

Comme déjà expliqué auparavant, le processus d'infiltration que nous voulions adopter dans le modèle à double perméabilité consistait à infiltrer une fraction de l'eau disponible en surface dans la matrice, en fonction de l'état d'humidité de la première couche de celle-ci. L'eau en excès étant ensuite infiltrée dans les macropores, dans la limite de la conductivité hydraulique de ceux-ci. L'organigramme *Figure 48* présente la séquence de calcul des flux infiltrés dans les deux compartiments du sol. Le processus d'infiltration dans la matrice et les macropores est conçu en considérant une connexion avec le réservoir de surface de type « SurfaceWaterStorage ». À chaque pas de temps, le modèle procède à l'infiltration dans la matrice, puis le modèle estime le volume d'eau restant dans le réservoir de surface. En fonction de la quantité d'eau restante, l'infiltration dans les macropores est activée. Si un surplus d'eau existe toujours, le ruissellement est généré.

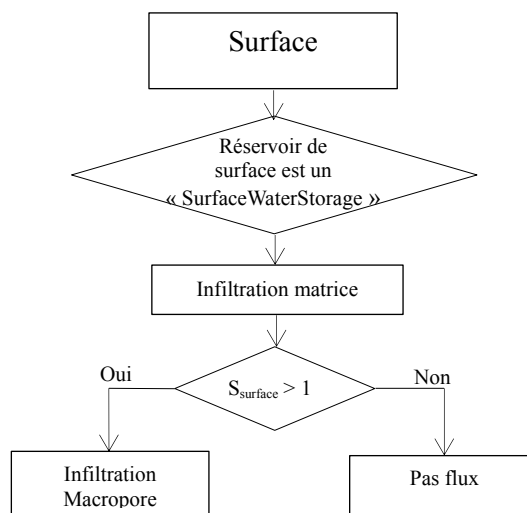


Figure 48 : Schéma simplifié de l'infiltration dans CMF suivant le modèle à DP.

Afin de moduler le partage de l'eau infiltrée en surface entre la matrice et les macropores, nous avons introduit un facteur dans la fonction de l'infiltration à la première couche du sol *MatrixInfiltration*, qui permet de gérer la fraction d'eau infiltrée dans la matrice. Certains modèles prennent en compte une telle partition, comme Hydrus, tandis que d'autres adoptent une approche simplifiée comme Macro. La version initiale de CMF, développée par P. Kraft pour les sols gonflants, considérait au contraire que l'eau s'infiltrait entièrement dans les macropores (ici larges fissures), sans passer par la 1^{ère} couche de la matrice.

Le débit d'infiltration dans la matrice est donné comme suit :

$$Q_{mx} = \gamma * CMF.MatrixInfiltration \quad (III.17)$$

Où, γ est un facteur fixé entre [0,1]. Si $\gamma = 1$ l'eau s'infiltrait d'abord dans la matrice jusqu'à la saturation ; si $\gamma = 0$, l'eau ne s'infiltrait que dans les macropores.

Par ailleurs, la fonction d'infiltration dans les macropores est donnée comme suit :

$$Q_{mp} = \text{minimum}(K_{mp} * A, (C_{mp} - V_{mp})/t_r) \quad (III.18)$$

Où, K_{mp} [LT^{-1}] est la conductivité hydraulique dans les macropores ; A [L] est l'aire de la couche ; C_{mp} [L^3] est la capacité des macropores ($C_{mp} = \text{Poref} * \Delta z * A$, où Poref est la fraction des macropores dans le sol, Δz est l'épaisseur de la couche et A est l'aire de la couche du sol) ; V_{mp} est le volume d'eau dans les macropores et t_r est le temps de rétention, donné par la formule suivante :

$$t_r = \frac{L}{v} = \frac{8L^2\mu}{R^2\Delta P} \quad (III.19)$$

Où, v [LT^{-1}] est la vitesse moyenne de l'écoulement d'un fluide dans un tube de courant donnée par la loi de Poiseuille, L [L] est l'épaisseur de la couche de macropores, identique à l'épaisseur de la couche du sol ; μ [Pa.s] est la viscosité dynamique de l'eau ; R [L] est le rayon des macropores et ΔP [L] est la différence du potentiel hydraulique entre les deux limites hautes et basses de la couche.

Cette approche que nous voulions développer adopte toutefois un fonctionnement différent du calcul interne de CMF, qui calcule tous les flux au même pas de temps, ce qui rend difficile une approche séquentielle des processus. Pour contourner cette difficulté, nous avons créé une liaison entre la fonction *MatrixInfiltration* et *MacroporeInfiltration*, de telle sorte que la première fonction possède comme fonction associée *MacroporeInfiltration*. Cette liaison permet d'estimer le volume d'eau disponible à la surface à chaque pas de temps, après avoir infiltré la fraction indiquée par l'utilisateur. La fonction d'infiltration dans les macropores *MacroporeInfiltration* est appelée une fois l'eau disponible en surface une fois l'infiltration dans la matrice déterminée. Ceci aurait toutefois nécessité l'introduction du pas de temps dans la fonction de calcul des flux « calc_q », valeur à laquelle le solveur ne donne pas accès.

Cette approche était la démarche initiale, qui nous paraissait cohérente avec la vision que l'on a des processus, et notamment, celle qui est adoptée dans Hydrus. Cependant, un tel développement n'est pas possible au sein de la plateforme de modélisation CMF. Par conséquent, nous avons dû nous résoudre à chercher une nouvelle fonction d'infiltration dans les macropores, qui ne fasse pas intervenir explicitement le

pas de temps de calcul, et ne s'appuie pas sur une description séquentielle des processus (infiltration dans la matrice, puis infiltration du surplus dans les macropores).

➤ **Approche finalement adoptée**

Nous avons choisi d'adopter une approche analogue à celle implémentée dans MACRO en activant l'infiltration dans les macropores à la saturation de la surface du sol. Une telle approche nous semble réalisable au sein de la plateforme de modélisation CMF. La nouvelle fonction d'infiltration dans les macropores est ainsi basée sur l'activation de la percolation dans les macropores à la saturation de la couche de surface de la matrice, comme suit :

$$\begin{cases} \text{Si } S_{mx_surface} \geq S_{sat} : Q_{mp} = K_{mp} * A_{mp} \\ \text{Si } S_{mx_surface} < S_{sat} : Q_{mp} \approx 0 \end{cases} \quad (\text{III.20})$$

Où, K_{mp} [LT^{-1}] est la conductivité actuelle des macropores, estimée en fonction de la conductivité hydraulique à saturation des macropores et de leurs conductivités actuelles.

b) Echanges entre les deux espaces poreux

La plupart des approches existantes représentant les échanges matrice-macropores se basent sur le pas de temps pour simuler le transfert de la matrice vers les macropores en cas de saturation de la matrice (MACRO) ou sur la différence de pression, qui impose une conceptualisation plus physique des macropores (Hydrus). Ces deux approches ne sont donc pas applicables dans la structure actuelle de CMF. Par conséquent, nous avons choisi de développer deux fonctions d'échange, alternatives. L'une, appelée *PhilipMacroMicroExchange* est simple et se base sur la différence de la teneur en eau entre les deux compartiments (Gerke and van Genuchten, 1993b). La deuxième fonction d'échange, appelée *JarvisMacroMicroExchange* se base sur l'approche adoptée dans MACRO, c.-à-d. une onde diffusante, permettant le transfert de l'eau des macropores vers les micropores.

1) *PhilipMacroMicroExchange (PhilipMME)*

Cette approche suppose que le terme d'échange entre la matrice et les macropores est proportionnel à la différence des teneurs en eau effectives des deux régions (Simunek et al., 2005 ; Phillip, 1968) :

$$\Gamma_w = \frac{\partial \theta_m}{\partial t} = c(S_{mp} - S_{mx}) \quad (\text{III.21})$$

Où, Γ_w [T^{-1}] est le taux de transfert d'eau entre les deux régions poreuses ; c [T^{-1}] est un coefficient du premier ordre ; S_{mx} [L^3L^{-3}] est la saturation de la couche de la matrice comme donnée dans le 1^{ier} chapitre ; S_{mp} [L^3L^{-3}] est la saturation du macropore (donné par la formule : $S_{mp} = V_{mp} / C_{mp}$). Le débit transféré entre la matrice et les macropores est donné par la relation suivante :

$$Q_{mp} = \Gamma_w * \Delta z * A \quad (\text{III.22})$$

Où, A [L^2] est l'aire de la couche du sol et Δz [L] est l'épaisseur de la couche du sol.

Cette fonction a été adaptée d'une telle façon que le transfert ne se produit que des macropores vers la matrice. En effet, cela nous semble cohérent avec le fait que l'approche adoptée dans notre nouveau modèle à double porosité est très conceptuelle et simplifiée, et qu'un échange dans les deux sens nécessite probablement une approche physique (Hydrus) ou numérique (MACRO) dont nous ne disposons pas au sein de la plateforme CMF.

2) *JarvisMacroMicroExchange (JarvisMME)*

Ce modèle d'échange d'eau entre les macropores et les micropores est basé sur l'approche présentée par (Gerke and van Genuchten, 1993a). Elle est également implémentée dans le modèle MACRO (Larsbo et Jarvis, 2003) et donnée dans l'équation (III.7). Cette fonction ne dépend pas de niveau du remplissage des macropores mais plutôt de la saturation de la matrice. Nous avons en effet évoqué plus haut que le calcul dans CMF se fait dans le même pas de temps, qu'il s'agisse du contrôle de la vidange de certains réservoirs, ou du remplissage d'autres. La cohérence physique de l'ensemble est assurée par des instances de contrôle.

Nous avons développé une nouvelle classe « Diffusivity », au niveau de la fonction de rétention VanGenuchtenMualem, permettant l'estimation du terme de diffusivité tel qu'il est implémenté dans le modèle MACRO, donnée par l'équation (III.9). Nous avons ainsi défini tous les paramètres spécifiant la diffusion et la rétention de l'eau dans les macropores. La rétention dans la matrice reste telle qu'elle est présentée dans le premier chapitre, sauf pour la couche de surface quand elle est proche à la saturation ($\approx 0,97$).

A la saturation de la matrice, telle qu'elle est implémentée dans CMF, le terme de diffusivité tend vers l'infini. En effet, le modèle Macro considère une saturation de la matrice strictement inférieure à 1 et une sursaturation qui ne se fait que numériquement sur un seul pas de temps. Dans MACRO, l'eau en excès de la capacité maximale des macropores est drainée à travers la matrice. Ce drainage se fait numériquement. Compte tenu de la façon dont elle est gérée dans MACRO, cette approximation ne pourrait être reproduite dans CMF que si on pouvait accéder au pas de temps. Pour éviter des problèmes numériques, et pour garder le même principe que le modèle MACRO, nous avons limité la diffusivité dans la matrice à Ψ_b .

Le développement des équations (III.9 et 10) dans CMF sont données comme suit :

➤ Si $S_{mx} \leq S_b$

$$D_{\theta mi} = \left[\frac{(1-m)K_{sat_mx}}{\alpha m(\theta_b - \theta_r)} \right] S \left[(1 - S^{1/m})^{-m} + (1 - S^{1/m})^m - 2 \right] \quad (III.23)$$

➤ Si $S_{mx} > S_b$

$$D_{\theta mi} = \left[\frac{(1-m)K_{sat_mx}}{\alpha m(\theta_b - \theta_r)} \right] S \left[(1 - S^{1/m})^{-m} + (1 - S^{1/m})^m - 2 \right] \quad (III.24)$$

Où, θ_{sat} [L^3L^{-3}] est la teneur en eau à saturation de la matrice dans; K_{sat_mx} [L] est la conductivité hydraulique à la saturation, donnée comme suit :

$$K_{sat_mx} = K_b \left(\frac{1}{S_b} \right)^l \left(1 - \left(1 - S_b^{1/m} \right)^m \right)^{-2} \quad (III.25)$$

Pour résumer, la *Figure 49* représente les fonctions développées dans le cadre de la thèse ou préexistantes (développées par P.Kraft).

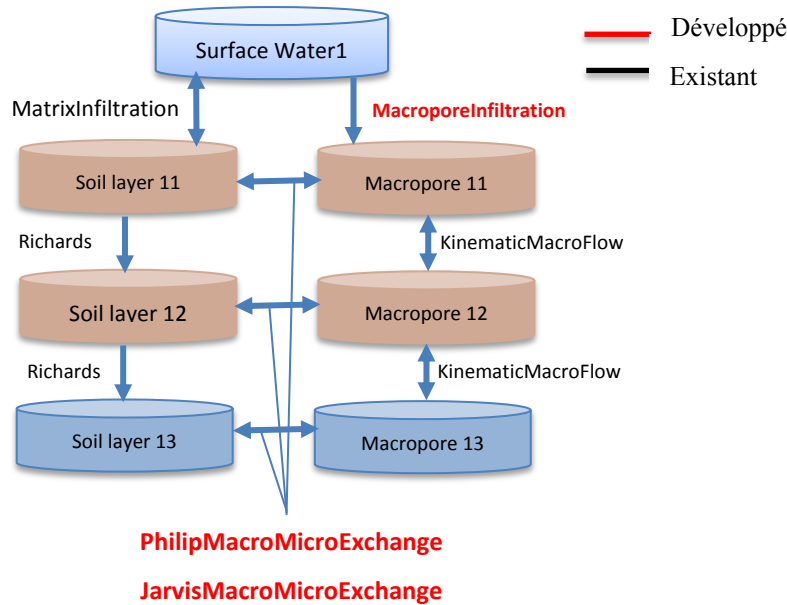


Figure 49 : Profil 1D avec les fonctions de CMF-DP existantes et développées dans le cas de la thèse.

III.5.2.3. Premiers tests sur un profil de sol 1D

Les développements au sein de la plateforme de modélisation CMF pour y intégrer la double perméabilité sont multiples, et chaque fonction doit être testée non seulement séparément, mais aussi en l'intégrant dans le fonctionnement global du modèle, ce qui impose une validation en plusieurs étapes. La première étape de validation a consisté à tester la fonction d'infiltration dans les macropores et à évaluer à partir de quel degré de saturation de la matrice, cette dernière sera activée.

Des simulations ont été menées sur un profil 1D du sol de 1 m de profondeur, dont la discrétisation verticale est de 2 cm d'épaisseur (50 couches). L'état initial est défini en spécifiant la nappe à 1 m de la surface avec un équilibre hydrostatique dans la matrice. Les macropores sont vides à l'état initial dans CMF. On définit les caractéristiques pour la matrice : $\theta_s = 0,5$; $\theta_r = 0,0$; $K_{sat_mx} = 1 \text{ m/j}$; $n = 1,211$; $\alpha = 0,2178 \text{ cm}^{-1}$ et les macropores : $K_{sat_mx} = 100 \text{ m/j}$; $\text{density} = 0,05$; $\text{porefraction} = 0,05$.

Un flux constant de 50 cm/j est défini à la surface du sol pendant la simulation, qui dure 10 jours avec un pas de temps de 5 min. L'infiltration dans la matrice est régie par les deux fonctions *MatrixInfiltration* en surface et *Richards*. L'infiltration dans les macropores est donnée avec *MacroporeInfiltration* en surface et *KinematicMacroFlow* dans les macropores. La *Figure 50* montre l'infiltration dans la matrice et les macropores ainsi que la saturation des deux compartiments du sol. On remarque que l'estimation de la saturation dans les macropores est très faible, de l'ordre de $10^{-3} \text{ (m}^3/\text{m}^3)$. Cette valeur aussi faible de la

saturation des macropores provient de la fonction d'estimation de la saturation dans les macropores (*head_to_volume*) développée initialement par P. Kraft. Dans son étude, il avait adopté une approche double perméabilité plutôt conceptuelle pour des sols gonflants, qui se comportent différemment des sols modélisés ici.

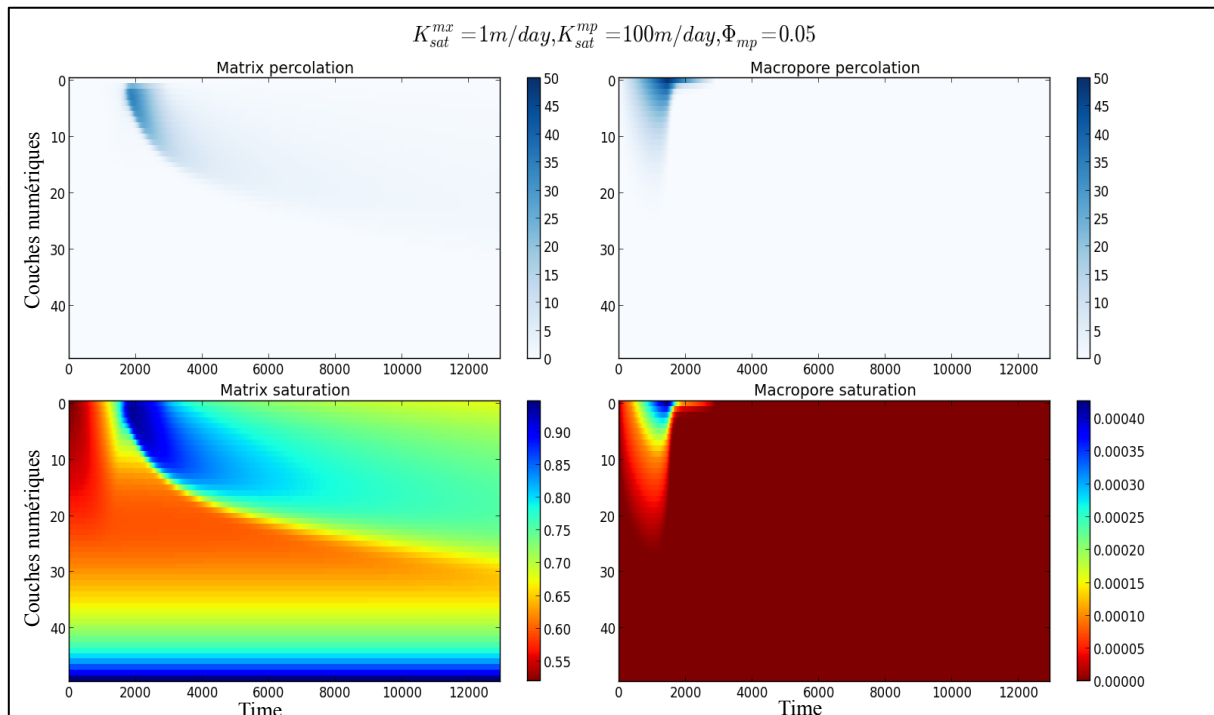


Figure 50 : Infiltration (haut) et taux de saturation (bas) dans un profil 1D du sol dans les compartiments matrice et macropore suivant un modèle à DP dans CMF.

Afin de comprendre d'où provient ce problème d'estimation du remplissage dans les macropores dans CMF, nous avons regardé de près les différentes fonctions intervenant dans l'actualisation de l'état d'humidité des réservoirs de macropores à chaque pas de temps en fonction de la donnée disponible. La fonction *head_to_volume* permet le calcul du volume d'eau dans les macropores à partir de la hauteur d'eau du réservoir macropores. La fonction *volume_to_head* permet à l'inverse l'estimation de la hauteur d'eau à partir du volume à chaque pas de temps. La Figure 51 montre le schéma de la fonction *volume_to_head* initialement implémentée dans CMF par P.Kraft. Elle est fonction de la pression dans la matrice et conduit à l'estimation d'un faible volume d'eau dans les macropores, malgré la quantité d'eau infiltrée. Elle adopte en effet une approche simplifiée, qui semble avoir été calée sur des expérimentations sur des sols gonflants. Ce cas ne s'applique pas pour le modèle que l'on souhaite développer ici, où on considère une capacité fixe des réservoirs représentant les macropores. La Figure 52 illustre ainsi l'approche que nous avons adoptée, en nous basant sur la volonté de représenter des macropores dont le volume est fixe. Le volume d'un réservoir de macropores est ici calculé en fonction de la fraction des macropores dans le sol (p), de l'épaisseur de la couche associée (l) et de l'aire de la couche (A) (cf équation III.17). En se basant sur ce principe, on estime la hauteur d'eau (*head*) dans chaque réservoir de macropores à chaque pas de temps, qui doit être inférieure à l'épaisseur de la couche correspondant au réservoir de macropores. Ainsi, le volume d'eau dans les

macropores est calculé à chaque pas de temps dans notre version tout en respectant que les macropores ont une capacité fixe.

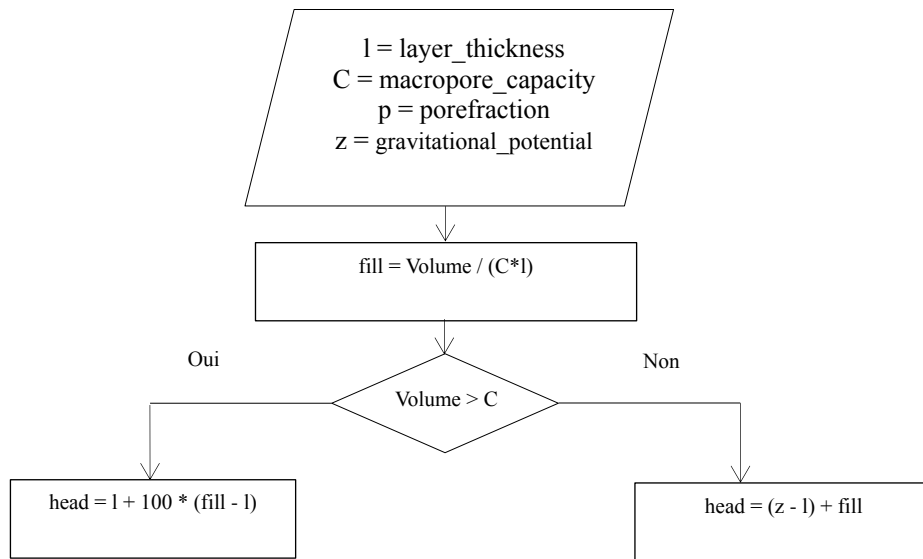


Figure 51 : Fonctions décrivant l'estimation du volume de réservoir de macropores dans la version de P. Kraft.

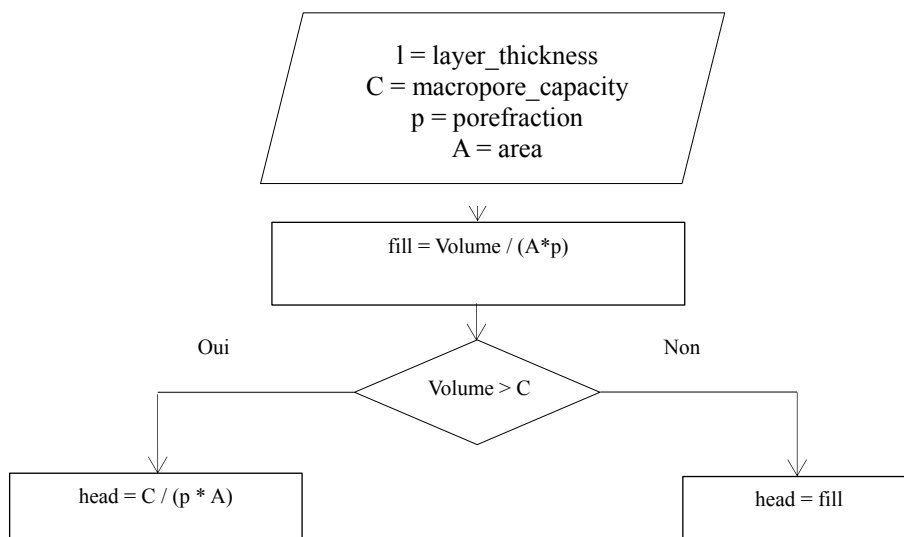


Figure 52 : Fonctions décrivant l'estimation du volume du réservoir de macropores dans notre modèle CMF-DP.

III.5.3. Conclusion

Nous avons présenté dans cette section la démarche suivie lors de développement de notre nouveau modèle à double perméabilité au sein de la plateforme CMF. L'impossibilité d'accéder au temps de calcul lors du développement a orienté notre démarche vers l'activation de l'infiltration dans les macropores à la saturation de la matrice du sol. Il faut maintenant tester et valider la nouvelle fonction d'infiltration dans les macropores et les deux fonctions d'échanges macropores-matrice ainsi que la fonction de percolation dans les macropores développée par P.Kraft. La validation est menée en comparant avec Hydrus, avec la version

représentant la double perméabilité.

III.6. Evaluation du module de double perméabilité sur différents scénarios

Afin de valider notre nouveau modèle à double perméabilité dans CMF, nous avons choisi de confronter les résultats de modélisation au modèle Hydrus. Cette validation sera menée en une dimension puis en deux dimensions, afin de s'assurer de la pertinence de la réponse hydrologique du modèle DP de CMF. Quatre critères sont ciblés comme références, qui sont l'infiltration dans la matrice, l'infiltration dans les macropores, le transfert entre les deux régions porales et les bilans d'eau.

La validation unidimensionnelle sera menée en trois étapes. La première étape consiste à comparer les simulations de CMF et Hydrus sur l'exemple 1D de sol limoneux présenté dans l'article de Simunek *et al.* (2003). Cet exemple va nous permettre d'avoir une référence validée par la communauté scientifique d'une part, et permettra de tester des conditions proches de celles du laboratoire avec un flux constant en surface et un drainage libre en bas du profil. La deuxième étape de validation, consiste à appliquer CMF sur 4 sols-types : Sandy loam, Clay loam, Silt loam, Sandy clay loam. Ceci sera mené en considérant un système à l'équilibre hydrostatique, afin de tester à la fois différentes conditions initiales et à la limite lors de cette comparaison. Un troisième exemple 1D est simulé avec une pluie en créneau comme conditions atmosphériques. La dernière étape de validation consiste à appliquer notre modèle sur un versant 2D. Vu le manque de données expérimentales, nous avons opté pour la comparaison avec les simulations produites par Hydrus2D.

III.6.1. Modélisation 1D du scénario de Simunek et al. (2003)

Dans le cadre des scénarios de validation de notre approche DP, nous utilisons les deux fonctions d'infiltration dans la matrice *MatrixInfiltration* en surface et *Richards* pour le reste du profil. Par ailleurs, nous testons notre fonction *MacroporeInfiltration* pour l'infiltration en surface des macropores et la fonction de percolation entre les différents réservoirs de macropore *KinematicMacroFlow*. Les deux fonctions d'échange, *PhilipMME* et *JarvisMME*, seront testées également. Nous avons donc deux approches à doubles perméabilité à simuler à chaque fois.

Méthodologie

L'application de Simunek *et al.* (2003) consiste à étudier l'infiltration dans un profil de 40 cm d'un sol limoneux (Silt loam), dont les caractéristiques hydrodynamiques sont données dans le *Tableau 14*. Le réservoir des macropores dans CMF est différent dans sa conception par rapport à l'approche d'Hydrus, qui considère ceux-ci comme un sol où le flux est régi par la loi de Richards. Par ailleurs, les macropores sont considérés comme vides à l'état initial dans CMF. Le seul paramètre qu'on peut caler pour avoir deux systèmes comparables avec Hydrus est la capacité du macropore à retenir à la saturation. Une pression

initiale de (- 100 cm) est considérée dans les deux régions dans Hydrus1D. Pour CMF, cela ne peut être considéré que dans la matrice, puisque les réservoirs des macropores sont vides à l'état initial. Un flux constant de 50 cm/jr est considéré en surface et un drainage libre en bas du profil. Le pas de temps est pris égal à 1 min avec une durée de simulation de 0,1 jour. La discrétisation verticale considérée dans Hydrus1D était de 4 mm (100 couches) et de 5 mm (80 couches) dans CMF. Nous avons testé trois valeurs de c (1, 3 et 5) dans le cas de la fonction d'échange *PhilipMME*.

Tableau 14 : Caractéristiques hydrodynamiques de l'exemple publié dans Simunek et al. (2003)

Paramètres	Hydrus2D	CMF
Matrice	$\theta_s = 0,5$ $\theta_r = 0,105$ $K_{sat_mx} = 1,05 \text{ cm/j}$ $n = 1,5$ $\alpha = 0,005 \text{ cm}^{-1}$	$\theta_s = 0,5$ $\theta_r = 0,105 ;$ $K_{sat_mx} = 1,05 \text{ cm/j}$ $n = 1,5$ $\alpha = 0,005 \text{ cm}^{-1}$
Macropores	$\theta_s = 0,5$ $\theta_r = 0,0$ $K_{sat_mp} = 2000 \text{ cm/j}$ $n = 2,0$ $\alpha = 0,1 \text{ cm}^{-1}$	Porefraction = 0,05 $K_{sat_mp} = 2000 \text{ cm/j}$ density=0,05
Interface	$\omega = 0,05$ $\beta = 3$ $\gamma_w = 0,4$ $K_{as} = 0,01 \text{ cm/j}$ $a = 1$	<i>PhilipMME</i> ($\omega=1, 3 \text{ et } 5$) <i>JarvisMME</i>

Résultats et discussions

La *Figure 53* représente la percolation dans chaque région porale. On remarque que l'infiltration dans la matrice est sous-estimée dans CMF par rapport à Hydrus1D. Une discrétisation plus fine, notamment en surface dans CMF permettrait d'apporter une amélioration à l'infiltration dans la matrice. Néanmoins, ceci n'était pas possible numériquement, car elle implique des épaisseurs fines pour les macropores, ce que ne permettent pas les propriétés actuelles de la classe du réservoir macropores qui sont héritées de la classe « SurfaceWater ». Le raffinement du pas de temps n'a pas non plus permis d'améliorer l'infiltration dans la matrice au début de la simulation. Comme déjà expliqué dans le premier chapitre, la plateforme CMF adopte un pas de temps interne, qui assure la convergence de la solution et qui a priori peut diminuer jusqu'à des fractions de seconde. Nous admettons que le solveur CVODE est performant mais ce calcul interne reste opaque, et l'impossibilité pour l'utilisateur d'interagir dans le calcul interne du solveur est contraignante pour formuler la représentation que l'on souhaite des processus (pas de représentation séquentielle typiquement).

L'infiltration dans les macropores s'active pratiquement au même temps que dans Hydrus1D, mais on observe un décalage léger par rapport à Hydrus1D. Par ailleurs, elle est plus rapide dans CMF, par suite de la conception des réservoirs de stockage des macropores, considérés initialement comme vides, et pour lesquels l'approche de remplissage et de vidange est très conceptuelle et simplifiée par rapport à Hydrus. Celui-ci considère les macropores comme des sols ayant une capacité de rétention, et les flux y sont régis par l'équation de Richards. On constate en comparant à Hydrus1D que le modèle CMF-DP développé n'est pas conservatif : pour Hydrus la somme des flux infiltrés dans la matrice et les macropores correspond au flux imposé en surface, ce qui n'est pas le cas pour notre modèle. Les échanges des macropores vers la matrice sont présentés dans la *Figure 54* ; nous remarquons que la fonction d'échange *PhilipMME* est semblable à Hydrus1D dans le cas de $c = 3$. Une sous-estimation est observée pour $\omega = 1$ et une surestimation pour $\omega = 5$, de même que pour la fonction d'échange *JarvisMME*.

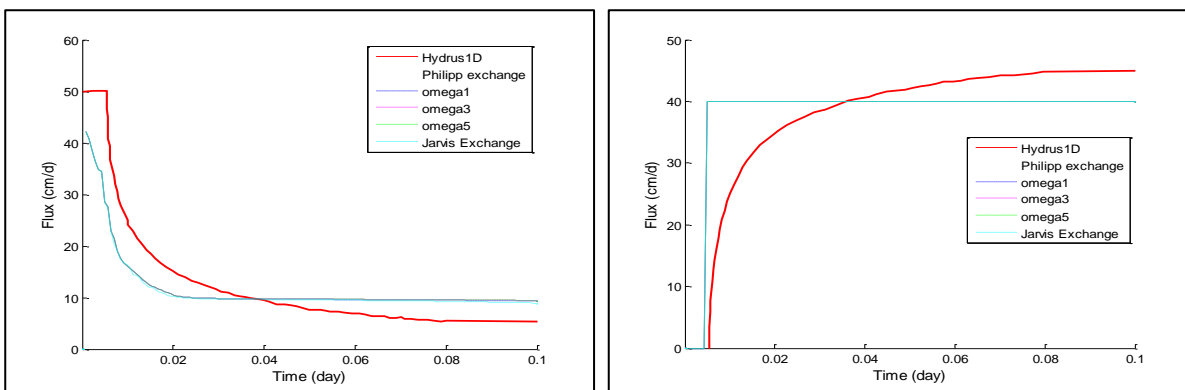


Figure 53 : Infiltration (cm/j) en surface de la matrice (gauche) et des macropores (droite) dans CMF et Hydrus1D dans le cas d'un sol limoneux.

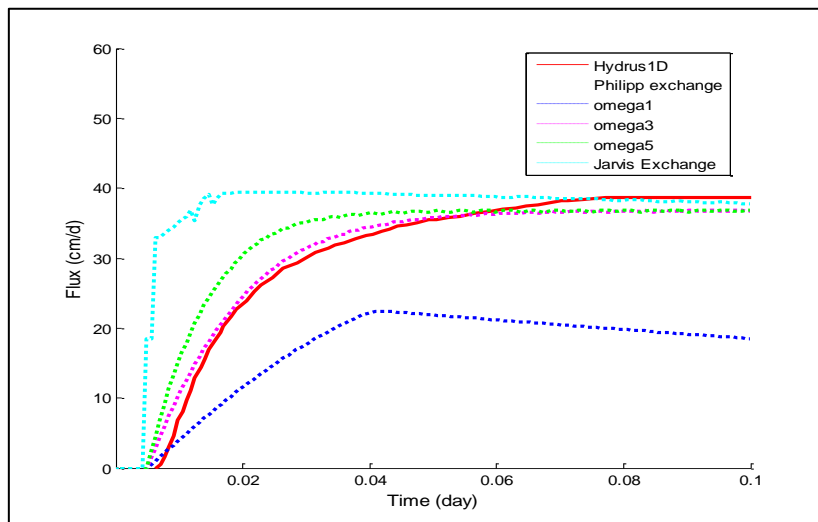


Figure 54 : Flux (cm/j) transféré des macropores vers la matrice dans CMF et Hydrus1D dans le cas d'un sol limoneux.

Les profils d'humidité correspondant à différents temps dans les deux modèles montrent que l'état d'humidité initial est différent entre CMF ($c=3$) et Hydrus1D. Ceci est dû à la performance numérique de modèle à double perméabilité de CMF et qui nécessite une discrétisation plus fine en verticale. Par ailleurs, on remarque que le profil d'humidité se propage plus lentement dans CMF que dans Hydrus1D. En bas du profil, l'humidité des couches est similaire dans les deux modèles. Le *Tableau 15* présente les erreurs des bilans d'eau des différents scénarios dans CMF ; on remarque que les erreurs sont faibles et que les simulations effectuées sont plutôt fiables.

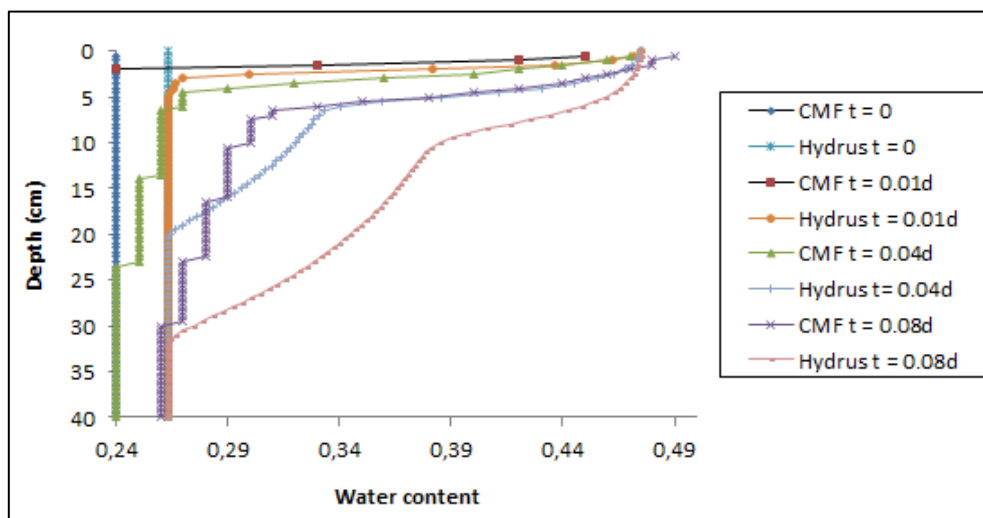


Figure 55 : Profil d'humidité dans la matrice dans CMF et Hydrus1D à différents pas de temps.

Tableau 15 : Erreurs des bilans d'eau des différents scénarios

Fonction d'échange	Variante	Erreur bilan d'eau
<i>JarvisMME</i>	/	0,5 %
<i>PhilipMME</i>	c 1	0,71 %
	c 3	0,59 %
	c 5	0,47 %

Conclusion

Les résultats montrent que les deux modèles sont comparables de point de vue du temps d'activation de l'infiltration dans les macropores et du débit maximal d'infiltration dans les macropores. Une sous-estimation du flux infiltré dans la matrice est due, probablement, à la puissance de calcul dans CMF. En outre, le modèle de double perméabilité dans Hydrus nécessite une discrétisation spatiale et temporelle fines. Les échanges entre les deux espaces poreux sont comparables dans le cas de la fonction *PhilipMME*, avec un coefficient $c=3$. Une surestimation de l'échange a été observée dans le cas de la fonction *JarvisMME*.

A travers l'exemple présenté dans l'article de Simunek *et al.* (2003), nous avons pu tester notre modèle de double perméabilité sur un sol limoneux. Nous avons choisi de valider sa réponse sur d'autres sols types, pour mieux caractériser sa réponse hydrologique, tout en poursuivant la comparaison avec Hydrus1D. Cette comparaison implique d'adopter des conditions initiales et aux limites similaires pour les deux modèles, pour chaque type de sol. Nous testons ici un flux moins important que dans l'exemple de l'article de Simunek *et al.* (2003), car celui-ci nous paraît élevé. Par ailleurs, nous avons considéré un équilibre hydrostatique à l'état initial. Nous testons également les deux fonctions d'échanges *PhilipMME*, et *JarvisMME*, en adoptant pour la première fonction une valeur de $c = 3$.

L'approche de *PhilipMME* permet un transfert des macropores vers la matrice ainsi que dans le sens inverse. Nous avons toutefois choisi dans le cadre de cette thèse de nous concentrer d'abord sur le transfert des macropores vers la matrice. En effet, la représentation d'un transfert dans les deux sens nécessiterait plusieurs instances de contrôle pour maîtriser le transfert de la matrice vers les macropores et vérifier que l'on n'aboutit pas à une teneur en eau négative dans la matrice. Une telle approche est difficile avec la conceptualisation simplifiée adoptée pour la représentation des macropores dans CMF, et nous avons donc décidé de nous en tenir dans un premier temps au transfert macropores vers la matrice.

III.6.2. Modélisation 1D sur les quatre sols-types

Méthodologie

Dans cette partie de comparaison de notre modèle à double perméabilité avec Hydrus1D sur quatre sols-types, nous visons principalement à identifier les points forts du modèle et les limitations si elles existent. On considère un profil du sol tel que dans l'exemple précédent avec 30 cm de profondeur. Une pression constante de -100 cm est considérée en bas du profil avec un équilibre hydrostatique à l'état initial. Un flux constant de 30 cm/jr est considéré en surface pendant tout le temps de la simulation. Ce nouveau système permettra de tester de nouvelles conditions initiales et aux limites, et l'état initial prescrit nous semble réaliste. Le pas de temps est pris égal à 1 min avec une durée de simulation de 0,1 jr. Les 4 sols-types choisis sont, du plus perméable au moins perméable : Sandy loam (SAL), Sandy clay loam (SCL), Clay loam (CLO), Silty loam (SIL). Les caractéristiques hydrodynamiques données le *Tableau 16* pour la matrice dans les deux modèles et dans le *Tableau 17* pour les macropores dans Hydrus1D. Ces paramètres ont été estimés à partir des paramètres des sols-types à simple porosité provenant des classes de sols du projet Aim-TEC (Brown *et al.*, 2012) en utilisant les formules suivantes (Köhne *et al.*, 2002; Gerke and Köhne, 2004) :

$$K_{\text{sat}} = w_f K_{\text{sat},f} + (1 - w_f) K_{\text{sat},m} \quad (\text{III.26})$$

$$\theta = w_f \theta_f + (1 - w_f) \theta_m \quad (\text{III.27})$$

Où, $w_f = 1 - w_m$ = fraction des macropores dans le sol et θ [$L^3 L^{-3}$] est la teneur en eau totale.

Nous nous sommes basées sur les paramètres proposés dans l'article de Simunek *et al.* (2003) et utilisés dans le scénario précédent pour le paramétrage de l'interface d'échange, car nous ne disposons pas d'autres descriptions de ces paramètres pour les différents sols. Ainsi, plusieurs tests ont été menés pour paramétrer l'interface d'échange ; nous avons pu constater que des formulations alternatives ne produisent pas la réponse souhaitée en terme d'échange dans Hydrus1D et conduisent à un signal perturbé. Par conséquent, les paramètres pris en compte pour l'interface dans Hydrus1D sont similaire à ceux utilisés dans l'exemple précédent (Simunek et al., 2003) : $\omega = 0,05$; $\beta = 3$; $\gamma_w = 0,4$; $K_{as} = 0,01$ cm/j et $a = 1$.

Tableau 16 : Caractéristiques hydrodynamiques de la matrice dans CMF et Hydrus1D des sols-types.

Sol-type	K_{sat_mx} (cm/j)	n	α (cm ⁻¹)	θ_s	θ_r
Sandy loam	10,6	1,89	0,075	0,46	0,065
Sandy clay loam	8,8	1,36	0,019	0,48	0,068
Clay loam	8,07	1,45	0,0101	0,44	0,087
Silty loam	3,7	2	0,02	0,45	0,071

Tableau 17 : Caractéristiques hydrodynamiques des macropores dans CMF et Hydrus1D des sols-types.

Sol-type	K_{sat_mx} (cm/j)	n	α (cm ⁻¹)	θ_s	θ_r
Sandy loam	1666	1,5	0,1	0,5	0,01
Sandy clay loam	911	1,3	0,1	0,5	0,01
Clay loam	836	1,5	0,1	0,5	0,01
Silty loam	830	2	0,1	0,5	0,01

Résultats et discussions

Les figures 56 à 59 illustrent les flux d'infiltration en surface dans la matrice et les macropores pour les 4 types de sols avec CMF et Hydrus1D. On constate tout d'abord que les 2 fonctions d'échange développées dans CMF, *PhilipMME* et *JarvisMME*, donnent quasiment les mêmes flux. Lorsque l'on compare avec Hydrus1D, les simulations de CMF montrent une sous-estimation du flux infiltré au début de la simulation pour tous les sols. Ceci est dû à la sensibilité de CMF par rapport à la discrétisation verticale et encore plus en double perméabilité. L'activation de l'infiltration dans les macropores est plus rapide dans CMF dans le

cas du sol Clay-Loam (*Figure 58*), et encore plus dans le cas du sol Sandy-Loam, où le flux infiltré est plus important au début de l'infiltration dans les macropores qu'après. Ceci peut être expliqué par l'accumulation d'eau en surface, l'infiltration dans la matrice étant, comme déjà dit, sous-estimée. Après un certain temps, on remarque un re-équilibre entre ce qui s'infiltré dans la matrice et dans les macropores dans le sol Sandy-Loam (*Figure 56*). Si on s'attache au temps de déclenchement de l'infiltration dans les macropores, les sols Silty-Loam et Sandy-Clay-Loam (*Figure 59 ; Figure 57*) sont similaires à Hydrus1D, tandis que pour les sols Clay-Loam et Sandy-Loam, on observe un décalage d'autant plus important pour les sols très sableux. Globalement CMF infiltre au débit maximal dans les macropores depuis le début de la simulation à cause de l'approche adoptée qui permet un transfert rapide dans les macropores, par comparaison au transfert régi par l'équation Richards dans Hydrus1D. En outre, cette approche ne permet pas d'estimer l'eau disponible en surface après infiltration dans la matrice mais plutôt l'eau dans le réservoir de surface et au même moment que l'infiltration dans la matrice. Cette approche nécessite l'application d'un flux entrant de telle sorte qu'une fois que l'infiltration est activée dans les macropores, le flux de connexion dans les macropores ne devrait en aucun cas être négatif car cela pourra entrainer la non-convergence de la solution numérique.

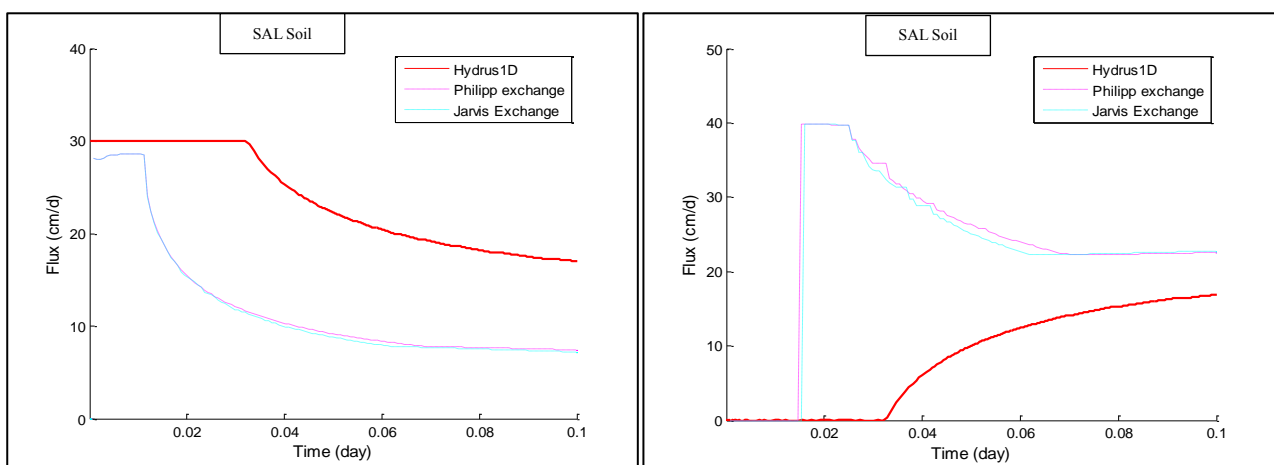


Figure 56 : Infiltration (cm/j) en surface dans la matrice (gauche) et dans les macropores (droite) dans le cas d'un sol SAL avec les modèles CMF et Hydrus1D.

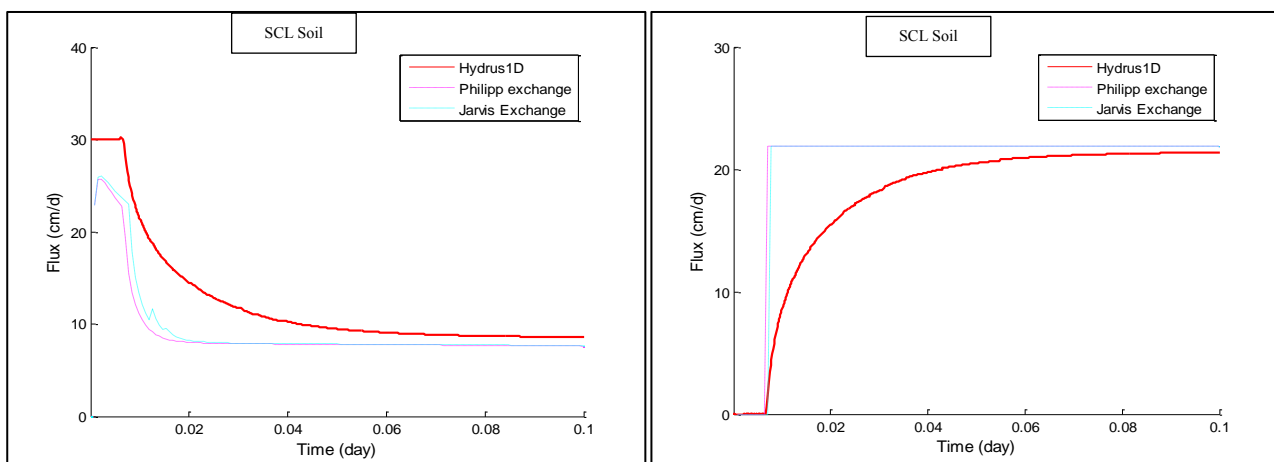


Figure 57 : Infiltration (cm/j) en surface dans la matrice (gauche) et dans les macropores (droite) dans le cas d'un sol SCL avec les modèles CMF et Hydrus1D.

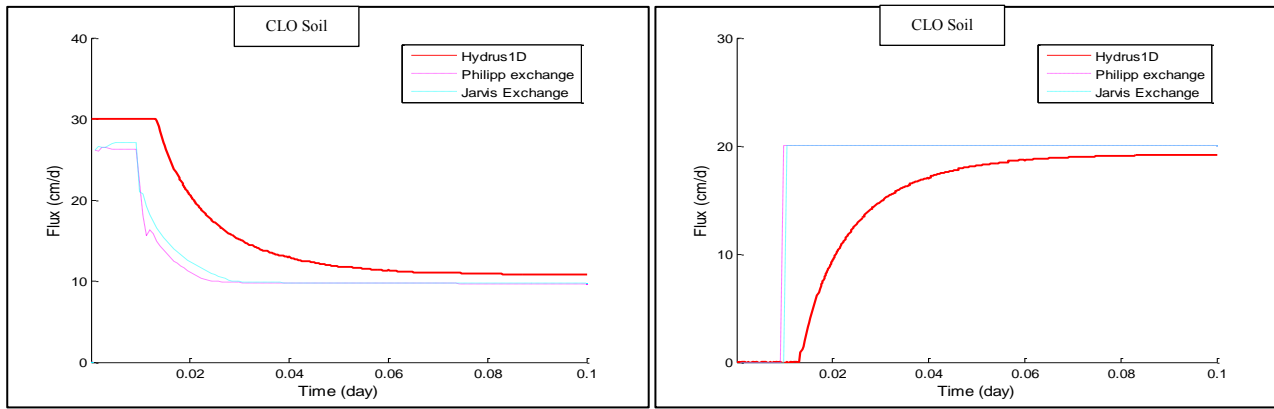


Figure 58 : Infiltration (cm/j) en surface dans la matrice (gauche) et dans les macropores (droite) dans le cas d'un sol Clay-Loam avec les modèles CMF et Hydrus1D

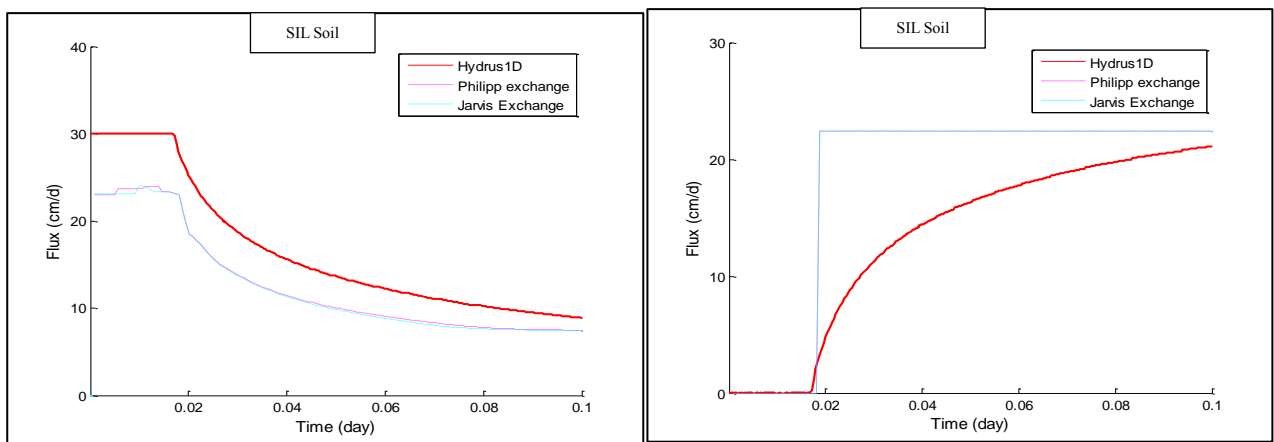


Figure 59 : Infiltration (cm/j) en surface dans la matrice (gauche) et dans les macropores (droite) dans le cas d'un sol Silty-Loam avec les modèles CMF et Hydrus1D.

Les flux de transfert des macropores vers la matrice sont présentés dans la Figure 60. On note que l'activation de l'échange est aussi rapide dans CMF, notamment dans le cas de la fonction d'échange *JarvisMME*. Une surestimation par rapport aux échanges dans Hydrus1D est globalement observée dans le transfert des macropores vers la matrice via la fonction de transfert *JarvisMME*. Le transfert est comparable entre Hydrus1D et CMF *PhilipMME* pour le sol SCL. Par ailleurs, le transfert est retardé dans Hydrus1D, l'infiltration dans les macropores étant en retard par rapport à CMF. Le décalage entre le début de l'infiltration dans Hydrus1D et CMF peut être expliqué par le fait que les macropores sont caractérisés dans Hydrus par une courbe de rétention, et le flux modélisé par l'équation de Richards, ce qui implique une relative uniformité dans le transfert vertical et latéral. Le transfert entre les deux domaines est sous-estimé dans Hydrus1D par rapport à CMF, sans doute parce que l'on a attribué des paramètres homogènes pour chaque type de sol, ne disposant pas des valeurs spécifiques à chaque sol.

Le Tableau 18 présente les erreurs des bilans d'eau estimés pour les différents sols-types modélisés. On remarque que les erreurs de bilan d'eau sont relativement faibles.

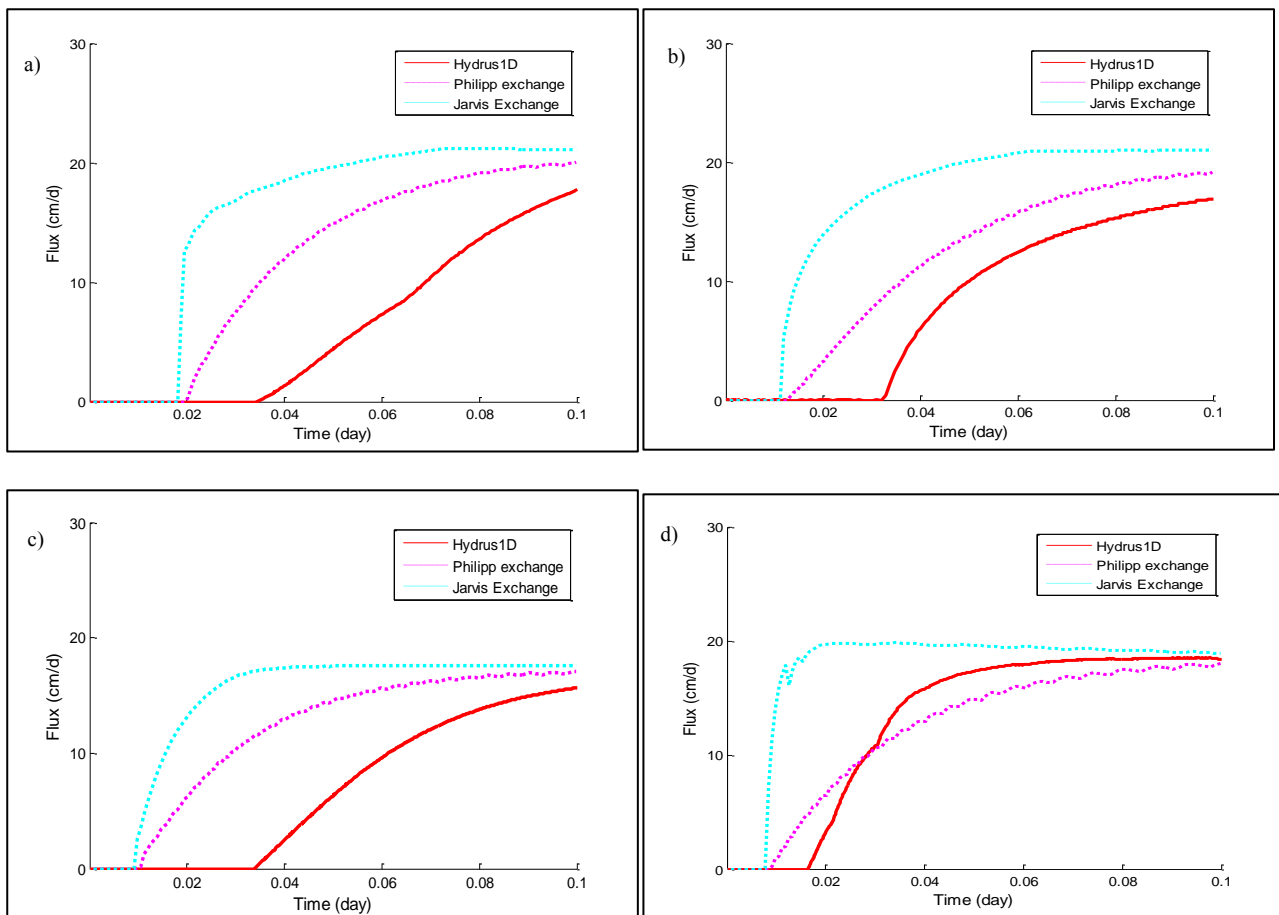


Figure 60 : Transfert des macropores vers la matrice (cm/j) dans le cas d'un sol a) SIL b) SAL c) CLO d) SCL dans CMF et comparaison avec Hydrus1D.

Tableau 18 : Erreurs des bilans d'eau des différents scénarios

Fonction d'échange	Type de sol	Erreur bilan d'eau
<i>JarvisMME</i>	SIL	0,18 %
	SAL	0,7 %
	CLO	0,43 %
	SCL	0,61 %
<i>PhilipMME</i>	SIL	0,53 %
	SAL	0,24 %
	CLO	0,40 %
	SCL	0,62 %

Conclusion

Nous avons validé notre modèle à double perméabilité en une dimension en le mettant en œuvre sur différents sols-types et en confrontant les résultats à des simulations menées dans Hydrus1D. Les résultats obtenus sont plutôt satisfaisants en termes d'infiltration dans la matrice et dans les macropores, ainsi qu'en termes de transferts des macropores vers la matrice, en particulier pour les sols qui ne sont pas trop perméables. Notre approche est plutôt avantageuse par rapport à Hydrus1D, puisqu'elle nécessite peu de

paramètres pour les échanges suivant les deux fonctions de transferts *PhilipMME* et *JarvisMME*. Des échanges faibles existent de la matrice vers les macropores, dans Hydrus1D avant l'activation de l'infiltration dans les macropores. CMF lui ne simule que les échanges macropores vers micropores : nous avons donc dû nous contenter de la comparaison des transferts des macropores vers les micropores.

III.6.3. Modélisation 1D sur un sol sableux-limoneux avec une pluie en créneau

Méthodologie

Le sol Sandy-Loam sous-estimant fortement l'infiltration dans la matrice, on souhaite approfondir l'analyse sur ce type de sol plus perméable. Le sol sableux-limoneux utilisé dans cette partie est décrit par les paramètres du *Tableau 19* (catalogue Hydrus). Une pluie de 3 mm/h depuis le début de la simulation et qui dure 4 h a été appliquée à la surface du sol. La simulation dure 24 h au total. Un flux nul est appliqué en bas du profil. A l'état initial, une pression de (-120 cm) est considérée en bas du profil, avec un équilibre hydrostatique. Le pas de temps est de 1 min dans les deux modèles.

Tableau 19 : Caractéristiques hydrodynamiques du sol dans CMF et Hydrus1D.

Paramètres	Hydrus2D	CMF
Matrice	$\theta_s = 0,4$ $\theta_r = 0,01$ $K_{sat_mx} = 0,66 \text{ mm/h}$ $n = 1,5$ $\alpha = 0,01 \text{ cm}^{-1}$	$\theta_s = 0,4$ $\theta_r = 0,01 ;$ $K_{sat_mx} = 0,66 \text{ mm/h}$ $n = 1,5$ $\alpha = 0,01 \text{ cm}^{-1}$
Macropores	$\theta_s = 0,5$ $\theta_r = 0,0$ $K_{sat_mp} = 46,6 \text{ mm/h}$ $n = 2,0$ $\alpha = 0,1 \text{ cm}^{-1}$	Porefraction = 0,05 $K_{sat_mp} = 46,6 \text{ mm/h}$ density=0.05
Interface	$\omega = 0,05$ $\beta = 3$ $\gamma = 0,4$ $K_{as} = 0,001 \text{ mm/h}$ $a = 1$	PhilipMME ($\omega=3$) JarvisExchange

Résultats et discussions

Les résultats montrent que l'infiltration dans CMF est sous-estimée par rapport à Hydrus1D, surtout au cours du premier pas de temps (*Figure 61*) : Hydrus infiltre la totalité de la pluie tandis que CMF démarre lentement son infiltration. A partir du deuxième pas de temps (2 min), on remarque une augmentation importante de l'infiltration dans la matrice, bien que cette dernière reste inférieure à celle simulée par Hydrus1D. Une amélioration de l'infiltration en surface de la matrice peut être obtenue en adoptant une

discrétisation plus fine en surface. Néanmoins, l'adoption d'épaisseurs fines pour les réservoirs macropores n'est pas possible à cause des caractéristiques de la classe représentant les macropores qui est différentes de la classe *SoilLayer* qui représente la matrice du sol. L'activation de l'infiltration dans les macropores a lieu plus tôt dans CMF (à 1,06 h) par rapport à Hydrus (2,11 h), et a déclenché une diminution de l'infiltration dans la matrice simulée par CMF, ce qui n'est pas le cas pour Hydrus1D, toujours parce que ce processus ne se base pas sur le même principe dans les deux modèles (*Figure 62*). Par ailleurs, l'infiltration en surface dans la matrice et les macropores se produit de la même façon dans CMF, quelle que soit la fonction de transfert utilisée.

Le transfert d'eau des macropores vers la matrice se produit avec un léger retard par rapport à l'activation de l'infiltration des macropores dans CMF (*Figure 63*). Il est plus rapide et plus important suivant la fonction *JarvisMME* et s'arrête pratiquement à la fin de la fin de l'infiltration dans les macropores. Par ailleurs, le transfert est moins important suivant la fonction d'échange *PhilipMME* (1,43 h), et a un peu en retard par rapport à la fonction *JarvisMME* (1,06 h) et nettement en avance par rapport à Hydrus1D (3,43 h), avec un flux cumulé bien plus important dans le cas de la fonction de transfert de Jarvis (2,53 mm/h) par rapport aux deux modèles CMF- *PhilipMME* (2,41 mm/h) et Hydrus1D (1,69 mm/h). Les deux transferts suivant *PhilipMME* et Hydrus1D perdurent 5 heures après la fin de l'évènement pluvieux et de façon similaire.

Les profils d'humidité de la matrice des simulations CMF selon les deux fonctions d'échange *JarvisMME* et *PhilipMME* montrent que ceux-ci sont proches de ceux produits dans Hydrus1D, notamment en surface pendant l'évènement pluvieux (voir *Figure 64* et *Figure 65*). Ensuite, les profils d'humidité de la matrice sont plus secs suivant CMF-*PhilipMME* par rapport à Hydrus1D. Cependant, compte tenu des échanges micropores/macropores importants dans CMF, qui se produisent pratiquement sur tout le profil du sol et en avance par rapport à Hydrus1D, l'humidité dans la matrice en bas de profil est plus élevée pour CMF que pour Hydrus, notamment pour la fonction d'échange *PhilipMME*. Les erreurs sur les bilans d'eau sont 1,08 % dans CMF et de 0,013% dans Hydrus1D, respectivement.

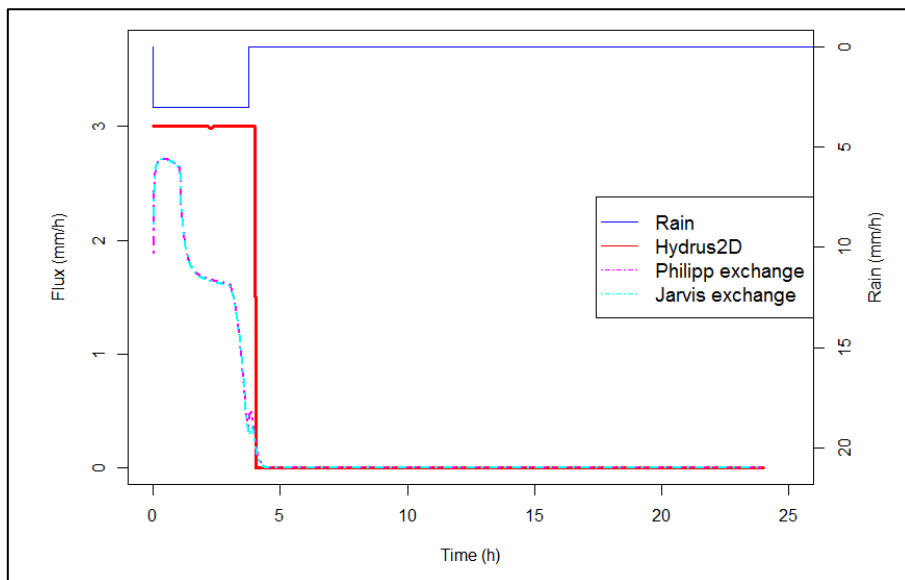


Figure 61 : Infiltration en surface de la matrice dans CMF et Hydrus1D.

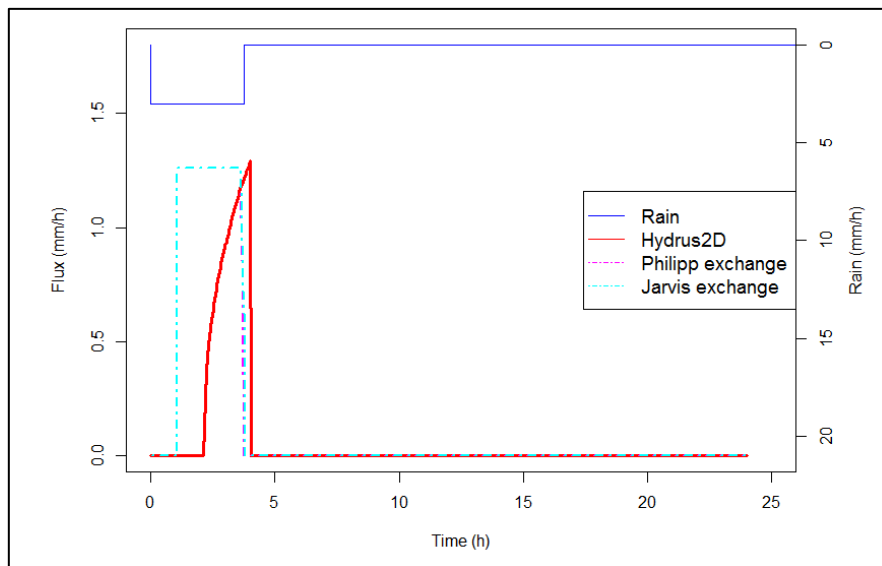


Figure 62 : Infiltration en surface dans les macropores dans CMF et Hydrus1D.

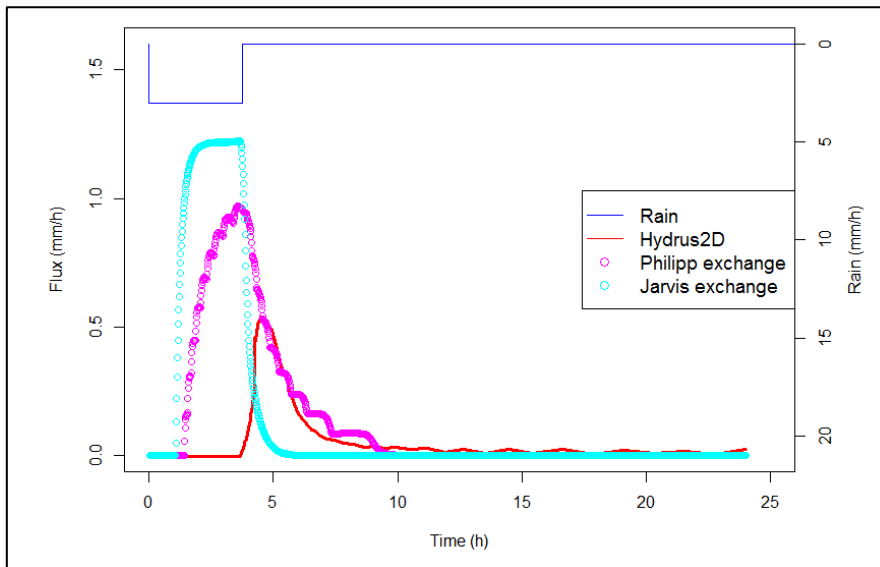


Figure 63 : Transfert des macropores vers la matrice dans CMF et Hydrus1D.

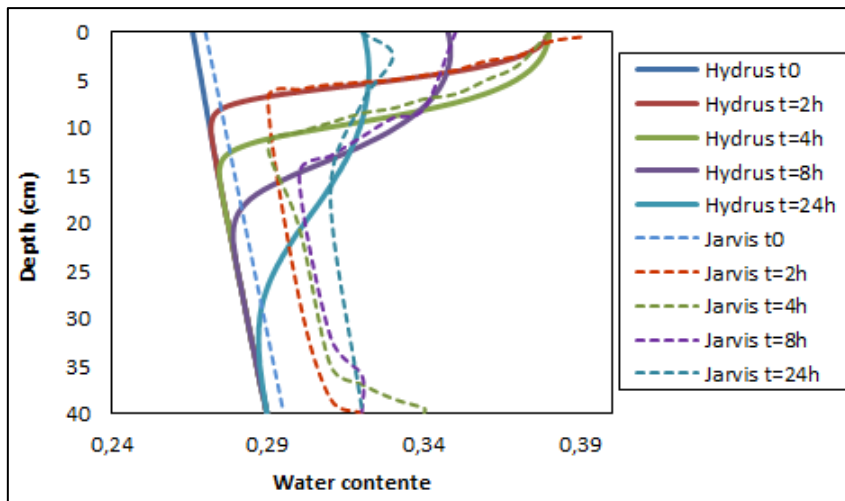


Figure 64 : Profils d'humidité de la matrice dans CMF-JarvisMME et Hydrus1D.

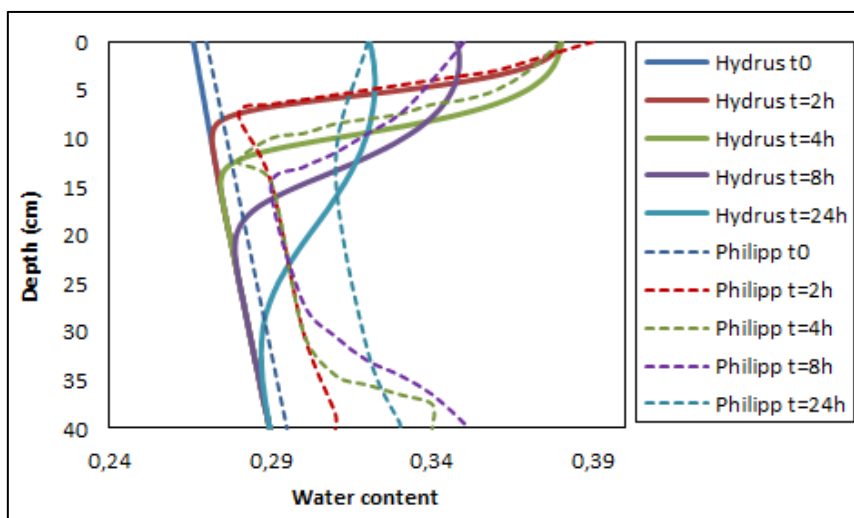


Figure 65 : Profils d'humidité de la matrice dans CMF-PhilipMME et Hydrus1D.

Conclusion sur la modélisation 1D verticale pour un sol sableux-limoneux à double perméabilité

Lors de ces simulations, nous avons pu comparer le modèle à double perméabilité développé dans CMF avec Hydrus1D sur un profil 1D d'un sol sableux-limoneux en variant les conditions aux limites de surface et en bas du profil. Les résultats ont permis de mieux caractériser les différences entre les deux modèles en terme d'activation de l'infiltration en surface ainsi qu'en termes de transfert hydrique des macropores vers la matrice. A la lumière de ces résultats, on peut conclure que le modèle DP dans CMF sous-estime l'infiltration dans la matrice. Par ailleurs, l'infiltration dans les macropores se produit en avance par rapport à Hydrus1D, parce que les deux approches sont différentes. Nous avons pu remarquer également que les échanges sont plus importants via la fonction d'échange *JarvisMME* par rapport à *PhilipMME* et Hydrus1D. Cependant, les échanges ne se produisent pas de la même manière sur le profil du sol dans les trois modèles DP. Ils sont similaires dans CMF-*JarvisMME* et Hydrus1D en surface. Par contre, les profils sont plus humides dans CMF du fait de l'importance des transferts des macropores vers la matrice. Comme le souligne Simunek et al. 2003, de par le manque de données permettant la validation, il y a un réel besoin de confronter les différents modèles de double perméabilité dans un cadre simple pour commencer. C'est ce que nous avons essayé de faire dans cette première partie.

III.6.4. Modélisation à deux dimensions

Méthodologie

Afin de valider le nouveau modèle à double perméabilité développé dans CMF en 2 dimension à l'échelle d'un versant, nous avons choisi de poursuivre la démarche adoptée au chapitre II, en considérant un versant de sol homogène, soumis à une pluie en créneau, et en comparant notre modélisation avec Hydrus2D. La comparaison est menée tout en étant conscient des différences de formalisme dans les deux modèles, qui s'accroissent encore ici avec des transferts préférentiels verticaux dans CMF et en deux dimensions dans Hydrus2D. Le scénario choisi correspond à un versant de 5% de pente, ayant un sol sableux-limoneux, pour un évènement climatique de 2 mm/h pendant 8 heures commençant 3 heures après le début de la simulation. Cette dernière a comme durée de 15 h avec un pas de temps de 1 min. Le versant modélisé dans cette section correspond au versant présenté dans la section (II.4.5) et ses caractéristiques hydrodynamiques sont présentées dans le *Tableau 19*.

Résultats et discussions

Le découpage dans CMF a été mené en considérant 5 mailles (20m x 20m) avec une profondeur du sol de 2 m et une discrétisation verticale de 5 mm. Par ailleurs, un découpage en éléments triangulaires avec un coefficient TS = 20 cm a été pris en compte dans Hydrus2D. Des conditions aux limites atmosphériques ont été appliquées à la surface du versant dans les deux modèles. Un flux nul est considéré en bas du versant ainsi que sur les frontières amont et aval. La nappe est considérée à 1,5 m de la surface à l'état initial. Les

critères de comparaison sont l'infiltration dans la matrice, l'infiltration dans les macropores ainsi que les échanges entre la matrice et les macropores.

La *Figure 66* montre que l'infiltration dans la matrice sur le versant se produit au même temps dans les deux modèles avec une sous-estimation dans CMF. Le temps de début et de la fin de l'infiltration dans les macropores est comparable. Par ailleurs, une surestimation de l'infiltration a été observée dans CMF avec un pic au début de l'infiltration. On peut conclure qu'à la saturation de la surface du versant, l'infiltration s'active dans les macropores dans CMF, ce qui mène à la diminution du flux infiltré dans la matrice (*Figure 67*). L'activation de l'infiltration dans les macropores a lieu avec un petit retard dans CMF (à 4,8 h) par rapport à Hydrus (3 h). Une stabilité entre le flux infiltré dans la matrice et celui infiltré dans les macropores est observée à partir de la 6^{ème} heure du début de la simulation et continue jusqu'à 10h. Lors de la dernière heure de l'évènement pluvieux, nous remarquons une diminution de l'infiltration dans la matrice. Les conditions atmosphériques utilisées dans ce cas d'étude sont les mêmes que celles utilisées dans le deuxième chapitre pour la modélisation en simple porosité, pour laquelle nous nous sommes basés sur les données réelles issues d'une station météorologique. Cette modélisation à simple porosité n'avait pas induit ce problème : celui-ci pourrait être dû à la considération d'un réservoir de macropores en surface, associé au réservoir de la matrice. Ainsi, nous n'avons pas remarqué de problème lors de la simulation double perméabilité 1D. Des tests supplémentaires doivent être menés en testant différentes intensités afin d'identifier la relation entre les caractéristiques hydrodynamiques du sol et le forçage imposé.

Le transfert des macropores vers la matrice est donné dans la *Figure 68*. On remarque que le transfert des macropores vers la matrice est un peu tardif dans CMF, l'infiltration dans les macropores se produisant tardivement par rapport à Hydrus2D. Ainsi, le transfert est plus important dans CMF suivant les deux fonctions d'échanges *PhilipMME* et *JarvisMME*. Les différences entre les deux modèles sont dues aux approches adoptées par chacun, mais ce premier test en 2D permet d'avoir une idée sur la réponse de CMF à l'échelle d'un versant. Notre approche simplifiée ne pourra toutefois être vraiment validée qu'avec des données expérimentales.

La comparaison CMF-DP / Hydrus 2D a été limitée pour la simulation d'un versant aux flux infiltrés en surface, que ce soit dans la matrice ou dans les macropores, ainsi qu'au flux de transfert des macropores vers la matrice. Cela vient du forçage choisi, qui ne favorise pas une infiltration profonde dans la matrice avant d'activer l'infiltration dans les macropores ainsi qu'aux problèmes numériques rencontrés.

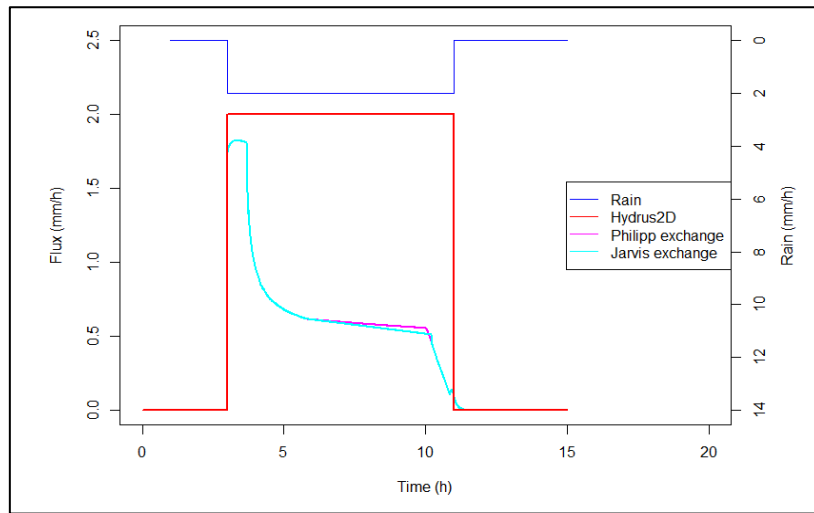


Figure 66 : Infiltration dans la matrice dans CMF et Hydrus2D en double perméabilité.

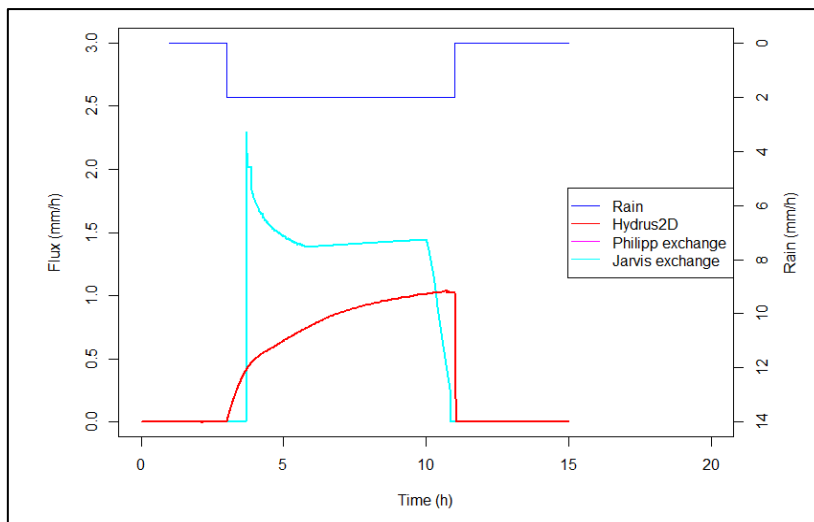


Figure 67 : Infiltration dans les macropores dans CMF et Hydrus2D en double perméabilité.

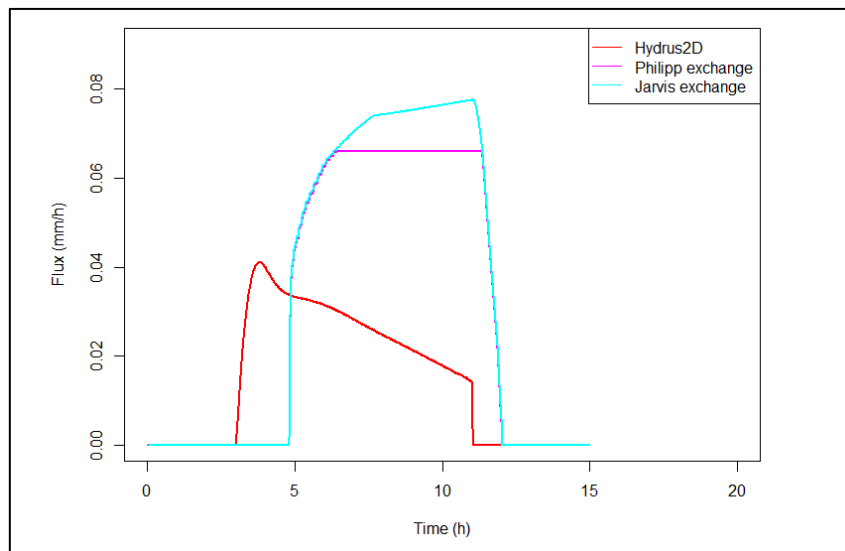


Figure 68 : Le transfert des macropores vers la matrice dans le versant dans CMF suivant les deux fonctions d'échange et dans Hydrus2D.

Conclusion de la modélisation 2D de double perméabilité au sein de la plateforme CMF

Notre modèle a été comparé avec Hydrus2D sur un versant en pente ayant un sol homogène en vue de caractériser la réponse du modèle de double perméabilité développé au sein de la plateforme CMF. Simunek *et al.* (2003) ont souligné la difficulté de l'application de l'approche adoptée par Jarvis pour les échanges dans MACRO en deux dimensions, ce qui était confirmé à travers ces exemples vus les problèmes de convergence rencontrés, notamment dans l'application en deux dimensions. Les résultats obtenus sont très satisfaisants en terme d'infiltration en surface, pour la matrice comme pour les macropores, ainsi que pour le transfert des macropores vers la matrice, notamment pour l'approche proposée par Jarvis. Cependant, notre modèle reste toujours moins performant numériquement et nécessite à mon avis une puissance supplémentaire de calcul. Evaluer réellement la représentativité du modèle développé CMF-DP supposera de le confronter à des données expérimentales, idéalement pour plusieurs types de sol et d'évènements pluvieux.

On peut envisager d'améliorer la résolution numérique du modèle CMF-DP et par conséquent de la convergence de la solution numérique. Celle-ci est estimée dans CMF par l'intermédiaire d'un pas de temps interne, ce qui ne permet pas au développeur d'y accéder et d'intervenir. Une non-convergence de la solution dans CMF peut ainsi être provoquée par un volume négatif d'un réservoir de stockage, ce qui peut provenir de la fonction d'infiltration dans les macropores en surface, qui infiltre en même temps que *MatrixInfiltration* ou des fonctions d'échange. Revoir les connexions de flux dans les macropores, avec la matrice et les conditions aux limites, pourra apporter plus de souplesse au modèle. C'est la raison pour laquelle, avec le développeur P. Kraft et son équipe à l'Université de Giessen, on souhaite apporter une nouvelle conceptualisation des macropores en changeant les propriétés de la classe « macropore » en la faisant hériter des mêmes propriétés de la classe « SoilLayer » et non pas de la classe « WaterStorage ». Ceci permettra plus de souplesse dans les connexions entre les réservoirs de stockage et probablement dans le calcul. Cette nouvelle conception permettra également de considérer des épaisseurs fines pour les couches de sol (matrice et macropores), notamment en surface et par conséquent, de représenter de façon plus souple l'infiltration meilleure en surface de la matrice. Nous rappelons en effet la sensibilité par rapport à la discrétisation verticale du processus d'infiltration dans CMF, qui a été montrée dans le chapitre précédent, alors que la structure actuelle du réservoir macropore ne permet pas des épaisseurs fines.

Des améliorations sont ainsi en cours de développement pour le calcul parallèle au niveau de la plateforme pour des applications en 3 dimensions et en double perméabilité.

Conclusion

A travers ce chapitre, nous avons présenté de façon générale les processus impliqués dans les transferts préférentiels, ainsi que quelques approches adoptées dans certains modèles, tels que MACRO, Hydrus2D et RZWQM. Sur la base de cette recherche bibliographique, nous avons pu choisir l'approche la plus adaptée pour être intégrée au sein de la plateforme, en conciliant notre volonté d'aboutir à une approche simplifiée d'un côté, et les contraintes de nonaccès au pas de temps dans la plateforme CMF. Le modèle considère le sol comme constitué de deux compartiments : matrice et macropores. Le transfert préférentiel dans la plateforme est régi par le biais d'une fonction qui permet l'activation de l'infiltration dans les macropores à la saturation de la couche de surface de la matrice, ainsi que par deux fonctions de transferts macropores-matrice (alternatives l'une de l'autre). La validation de ce nouveau modèle a été menée sur plusieurs étapes.

La comparaison du modèle CMF-DP avec l'exemple publié dans Simunek et al. (2003) a donné une réponse proche entre CMF et Hydrus1D sur un sol limoneux en termes d'infiltration dans les deux compartiments poreux, notamment pour l'infiltration dans les macropores. Une sous-estimation de l'infiltration dans la matrice a été observée tout le long de la simulation. La modélisation développée dans Hydrus1D s'appuie sur une discrétisation spatiale et temporelle très fine ($\Delta z = 4\text{mm}$, $\Delta t_{\min} = 10^{-6}\text{min}$), comparée à celle, plus grossière, utilisée dans CMF ($\Delta z = 5\text{mm}$, $\Delta t = 1\text{min}$). Un pas de temps plus petit de 1 min n'a pas fourni d'amélioration dans la réponse de CMF sur l'infiltration dans la matrice. Une discrétisation verticale plus fine, rapprocherait probablement les résultats d'infiltration dans la matrice dans CMF de ceux de Hydrus. Cependant, ceci n'était pas possible et a toujours produit une non-convergence de la solution numérique. Les transferts entre macropores et micropores étaient comparables entre Hydrus et CMF dans le cas de la fonction de transfert *PhilipMME* avec c égal à 3. Cette fonction, jusqu'à présent appliquée pour la double porosité, a montré qu'elle est bien adaptée à la représentation des transferts des macropores vers la matrice en double perméabilité avec la conceptualisation choisie.

Les comparaisons de la réponse de CMF avec Hydrus1D sur différents sols-types ont permis de caractériser la réponse de CMF sur des cas de profil 1D de sol. Les résultats montrent que la fonction d'échange *JarvisMME* est aussi importante et le transfert est aussi rapide. L'activation de l'échange macropores→micropores en même temps que l'activation de l'infiltration dans les macropores est liée au choix que nous avons effectué lors de développement des fonctions dans CMF (comme expliqué dans la section (III.7.2.)) en spécifiant la même condition pour des raisons numériques que ce soit la saturation de la matrice pour MacroporeInfiltration et *PhilipMME* ou P_{si_b} dans le cas de *JarvisMME*.

La paramétrisation de l'interface d'échange dans Hydrus n'est pas vraiment documentée, et ce encore moins pour des types de sol différents. De ce fait, nous avons utilisé les mêmes paramètres que ceux utilisés dans Simunek et al. (2003) pour tous les sols-types, en se basant sur une approximation de la conductivité hydraulique de l'interface d'échange. Cette dernière est considérée proportionnelle à 1/10 ou 1/100 de la conductivité hydraulique de la matrice pour chaque sol-type : la sous-estimation du transfert macropores → micropores dans Hydrus par rapport à CMF est probablement due aux paramètres choisis.

La résolution numérique en deux dimensions sur des versants fait intervenir également des transferts latéraux, et augmente le nombre de réservoirs de stockage à prendre en compte. Les résultats ont montré que le modèle est applicable, malgré la présence résiduelle de problèmes de convergence pour certains jeu de données, qui nécessite de poursuivre sa validation. On peut conclure de ces simulations qu'il est important d'avoir un réservoir de macropores qui a les mêmes caractéristiques que la matrice (SoilLayer), d'où l'intérêt de pouvoir infiltrer d'une manière pas trop rapide dans les macropores et introduire des instances de contrôle adéquates pour éviter la non-convergence de la solution numérique, en particulier en deux-dimensions. Ceci permettra d'introduire le transfert latéral dans les macropores à long terme.

Nous avons maintenant développé un modèle à une et deux dimensions en double perméabilité et qui englobe les processus advenant le transfert de l'eau à l'échelle d'un versant y compris le ruissellement, ce qui n'est pas possible avec Hydrus2D ou un autre modèle à double perméabilité à l'heure actuelle. Le prochain chapitre consiste à appliquer notre modèle en incluant le transfert des substances réactives.

Chapitre IV : Modélisation du transfert de solutés au sein de la plateforme de modélisation CMF

Chapitre IV : Modélisation du transfert de solutés au sein de la plateforme de modélisation CMF

Introduction : Transferts hydriques des pesticides.

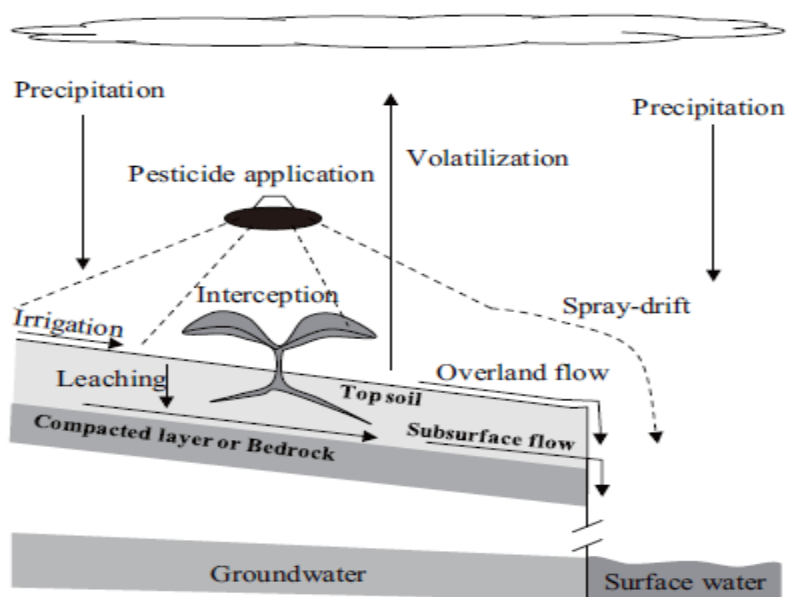
L'utilisation des pesticides engendre potentiellement deux types de contamination : le premier est la pollution ponctuelle quand ils sont déversés, le plus souvent de façon accidentelle, sur des petites surfaces, le deuxième est la pollution diffuse quand la contamination est issue de l'application sur une grande surface. C'est bien à cette dernière qu'on s'intéresse : on souhaite représenter le comportement des pesticides dans les sols et leurs transferts vers le milieu aquatique à l'échelle du versant.

Les produits phytosanitaires comprennent des substances minérales, des composés organochlorés, des composés organophosphorés ou des composés organiques ou organométalliques. L'eau est un des facteurs de migration des produits phytosanitaires vers les eaux profondes et superficielles (Leonard, 1990; Tang *et al.*, 2012). Au cours du transport par l'eau dans le sol et la zone non saturée, des processus d'adsorption/désorption et des processus de dégradation se produisent, qui peuvent freiner ou atténuer la migration. Les quantités transportées ne représentent qu'une faible fraction des quantités épandues, qui peuvent toutefois suffire à poser problème pour l'environnement.

L'étude du devenir des pesticides dans et sur le sol suppose donc la prise en compte de plusieurs processus, dont la connaissance et la quantification sont importantes pour caractériser le lien entre leur utilisation et la compréhension des eaux de surface, et permettre de proposer des moyens d'action pour limiter cette dernière. La représentation du devenir et du transfert des pesticides vers les milieux aquatiques superficiels ou souterrains est complexe. En effet, l'hétérogénéité spatiale et temporelle des propriétés physiques, chimiques et biologiques du sol, ainsi que la variabilité des conditions météorologiques induisent un transport variable des solutés réactifs sur et dans les sols. En particulier, la prise en compte des transferts préférentiels dans les sols structurés s'avère nécessaire, comme déjà évoqué au chapitre précédent. En effet, des quantités significatives de pesticides sont transférées via les macropores vers les eaux souterraines avant d'avoir le temps de s'adsorber ou de se dégrader (Stagnitti *et al.*, 1994). Ainsi, le mouvement des substances actives dans la matrice du sol est souvent lent, et le temps de séjour dans la couche arable peut être suffisant pour qu'elles soient dégradées ou adsorbées avant d'atteindre les horizons profonds ou les eaux souterraines.

A l'inverse, le transport des substances dans les macropores ne permet pas à ces processus de se dérouler, et augmente le taux de matière transportée (Kördel *et al.*, 2008).

La plupart des études ayant abordé le devenir des pesticides présentent la diffusion moléculaire, la convection et la dispersion comme des processus significatifs dans le transfert des pesticides dans le sol (Singh *et al.*, 1992; Vauclin, 1994; Louchart *et al.*, 2000; Voltz *et al.*, 2003). La *Figure 69* représente ainsi les différentes voies de transfert des pesticides dans un versant ou un petit bassin versant agricole en pente, dans le cas où une couche imperméable est présente en bas du profil (Tang *et al.*, 2012). Le transfert peut également se produire par dérive (Jury *et al.*, 1987). D'autres processus physico-chimiques interviennent également dans le devenir des produits phytosanitaires dans les terrains agricoles, comme la dégradation, la sorption, ou la volatilisation (Calvet, 2005).



*Figure 69 : Représentation es voies de transport des pesticides à partir des terres agricoles en pente avec une couche imperméable (Tang *et al.*, 2012).*

Un modèle représentant le devenir et le transfert hydrique des pesticides au sein d'un bassin versant doit donc pouvoir représenter l'ensemble de ces processus. La nécessité, explicitée plus haut, de conceptualiser le sol en deux ou plusieurs compartiments, pour permettre la représentation des transferts préférentiels, et la prise en compte de l'hétérogénéité spatiale des bassins versants rendent l'exercice complexe. On peut d'ailleurs noter que la plupart des modèles à double perméabilité sont des modèles à une dimension. Pourtant, l'objectif visé dans cette thèse, de développer un modèle représentant les processus dominant le devenir des pesticides à l'échelle du versant, et pas seulement du profil de sol, implique de développer une modélisation du transport de solutés réactifs en deux dimensions. Ce sera l'objet de ce chapitre.

Après avoir présenté les approches le plus fréquemment utilisées pour représenter les processus cités ci-dessus, nous présentons la démarche adoptée dans la plateforme CMF pour représenter le transfert de solutés réactifs. Nous mettons alors cette approche en œuvre sur des cas de complexité croissante (profil

unidimensionnel, d'abord pour un sol de texture homogène, puis pour un sol comportant des macropores ; puis approche bidimensionnelle), en confrontant à chaque fois les résultats avec ceux obtenus pour des simulations similaires réalisées avec Hydrus1D puis Hydrus2D.

IV.2. Représentation des processus régissant le devenir des pesticides dans l'environnement

La description du transport des substances chimiques dans les milieux poreux, et spécifiquement dans la zone non saturée où se déroulent la plupart des transformations (biologiques ou abiotiques), dépend de l'échelle de l'étude où se manifestent les phénomènes de transfert et de dégradation dans le sol (Vauclin, 1994). Les processus de dissipation et de transfert dépendent principalement des propriétés du sol, des caractéristiques physico-chimiques des produits épanchés, des conditions climatiques, et de la végétation. Je présente dans cette section les mécanismes régissant le transfert des substances, en abordant les équations qui seront utilisées dans ce qui suit. Cette présentation n'est pas exhaustive, on se focalise sur les mécanismes qui nous paraissent les plus significatifs pour l'échelle visée.

a) Advection ou Convection

La convection (également appelée advection) représente l'entraînement des solutés par le seul mouvement de l'eau dans le milieu poreux. Le déplacement moyen des substances par convection est ainsi égal à la vitesse moyenne du mouvement de l'eau, en cas de substances non réactives. Dans l'équation de transport par advection pure, le soluté se déplace à la même vitesse que l'eau.

b) Dispersion cinématique

A l'échelle macroscopique, la dispersion cinématique est un phénomène de mélange essentiellement lié à l'hétérogénéité des vitesses de déplacement de l'eau (De Marsily, 1981). La microstructure du milieu poreux provoque une variation de la vitesse de l'eau en magnitude et en direction ce qui entraîne une dilution des solutés par dispersion cinématique. Cette dernière peut être décrite suivant une dispersion longitudinale qui suit la direction de l'écoulement et une dispersion transversale dans le plan orthogonal à la direction de l'écoulement.

c) La diffusion moléculaire

Au niveau des pores de petites dimensions, où la vitesse du liquide est très faible, la diffusion moléculaire est le seul phénomène de transport. Elle peut se manifester indépendamment de l'advection. La diffusion moléculaire joue sur le déplacement individuel des molécules, de leur position d'équilibre vers une autre position d'une façon aléatoire. Elle est liée à l'existence de gradient de concentration dans l'eau et provient de l'agitation des molécules, qui tend à homogénéiser la concentration de soluté dans le milieu (Calvet, 2005).

d) Représentation mathématique de transport de substances

Fondamentalement, le modèle décrivant le transport des substances chimiques dans les milieux poreux est l'équation de convection-dispersion. D'après Singh *et al.* (1992), au niveau macroscopique, la dispersion hydrodynamique et la diffusion moléculaire ont des effets similaires. Pour des vitesses d'écoulement inférieures à 10^{-7} cm/h, la diffusion moléculaire joue un rôle important dans la dispersion du soluté. Dans le cas contraire, la diffusion moléculaire est à négliger devant la dispersion mécanique.

Le modèle le plus approprié pour la description de transfert des pesticides, solutés réactifs, est l'équation de convection-dispersion, tenant compte de l'équilibre entre phases sorbée et en solution. Elle est donnée dans le cas d'un milieu poreux homogène en équilibre, comme suit (source : manuel technique d'Hydrus):

$$\frac{\partial \theta c}{\partial t} + \frac{\partial \rho s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial q_i c}{\partial x_i} + \mu_w \theta c + \mu_s \rho s + \gamma_w \theta + \gamma_s \rho \quad (\text{IV.1})$$

Où, c [ML^{-3}] est la concentration en solutés; s est la concentration adsorbée ; ρ [ML^{-3}] est la densité du sol ; D_{ij} [L^2T^{-1}] est le tenseur de dispersion ; θ [L^3L^{-3}] est la teneur en eau volumique du sol ; q_i [LT^{-1}] est le $i^{\text{ème}}$ composant du flux volumétrique ; μ_w et μ_s sont les constantes de premier ordre pour les solutés dans les phases liquide et solide, γ_w et γ_s sont les constantes d'ordre zéro.

Les composantes du tenseur de dispersion, D_{ij} , peuvent être décrites comme suit :

$$\theta D_{ij} = D_T |q| \delta_{ij} + (D_L - D_T) \frac{q_j q_i}{|q|} + \theta D_d \tau \delta_{ij} \quad (\text{IV.2})$$

Où, D_d [L^2T^{-1}] est la diffusion moléculaire dans l'eau libre ; τ est la tortuosité ; q est la densité de flux de Darcy [LT^{-1}] ; δ_{ij} est la fonction de Kronecker et D_L et D_T [L] sont les coefficients de dispersivités longitudinale et transversale du traceur dans le milieu, et égaux à la vitesse de Darcy multipliée par un coefficient dit de diffusion intrinsèque, ou dispersivité, dans chaque direction (De Marsily, 1981).

A travers des modèles théoriques, plusieurs auteurs ont prouvé que la dispersivité est fortement dépendante de la teneur en eau dans le cas des sol non saturés (Haga *et al.*, 1999 ; Toride *et al.*, 2003 ; Sato *et al.*, 2003). D'autres études ont prouvé que la dispersivité augmente avec la distance parcourue lors d'un écoulement bidimensionnel dans un milieu poreux (Burns, 1996 ; Roth and Hammel, 1996). Une adaptation des coefficients de dispersivité longitudinale et transversale en fonction du type du sol et de l'échelle de l'écoulement (monodimensionnel ou bidimensionnel), est à prendre en compte. On peut pour cela se baser sur des expériences aux laboratoires déjà effectuées. Dans le cas des transferts préférentiels, par exemple, des expériences menées par Jaynes *et al.* (2001), étudiant le transport de plusieurs solutés dans des sols drainés limoneux, ont utilisé une dispersivité longitudinale qui correspond à 15cm.

e) Adsorption-désorption

Le terme d'adsorption désigne la rétention des substances actives sur une phase solide ; c'est un mécanisme complexe, qui aboutit au partage des polluants organiques entre la phase liquide et solide (Sabatini and Austin, 1990; Brusseau, 1995). La désorption est le processus inverse. Ces deux phénomènes

sont décrits par des isothermes d'équilibre (calvet, 2003) mais une approche cinétique peut être utile pour tenir compte du fait que cet équilibre n'est pas instantané, comme montré dans le schéma suivant. En effet, ce phénomène se déroule sur des durées très variables, de la fraction de seconde à plusieurs jours, voire quelques mois (Calvet, 1989).



La cinétique de l'adsorption-désorption dépend de plusieurs facteurs, y compris les propriétés du sol, la nature du polluant, et les conditions physico-chimiques, notamment pH et l'humidité. La sorption est le mécanisme retardateur principal du transfert des polluants organiques.

Plusieurs formulations ont été proposées dans la littérature pour représenter les isothermes d'équilibre ; nous présentons les deux formulations les plus utilisées et les plus répandues en termes de modélisation des substances réactives, que sont l'isotherme linéaire et l'isotherme de Freundlich. En général, l'isotherme d'adsorption linéaire s'applique pour des concentrations faibles de solutés et/ou à des faibles charges de l'adsorbant. L'isotherme de Freundlich est plutôt valide quand des phénomènes de sorption sur différents sites se chevauchent, en cas de sorbant complexe (Delle Sitea, 2001).

Le modèle de Freundlich est le plus communément utilisé (Van Bemmelen, 1888; Freundlich, 1909). L'isotherme de Freundlich est donné par la formule :

$$X = K_F C^{1/n} \quad (\text{IV.4})$$

Où, $X [M L^{-3}]$ est la concentration adsorbée du soluté dans la phase solide, $K_F [L M^{-1}]$ est le coefficient de Freundlich, $C [M L^{-3}]$ est la concentration initiale du soluté, et n est une constante indiquant l'intensité de l'adsorption.

f) Dégradation

La dégradation peut être due à plusieurs processus : photolyse à la surface de la végétation ou du sol, hydrolyse dans l'eau, dégradation biotique ou abiotique dans le sol, avec une forte prédominance des processus biologiques dans la couche biologiquement active du sol (Hayo, 1997). Les différents processus intervenant dans la dégradation dépendant beaucoup des conditions environnementales (nature du sol et activité biologique, conditions d'humidité, température ...), celle-ci ne dépend pas seulement de la structure chimique de la molécule. On en rend le plus souvent compte par la demi-vie de la molécule, ou DT_{50} , qui représente le temps nécessaire pour la dégradation de la moitié de la quantité initiale dans les conditions de dégradation du milieu.

La dégradation des éléments chimiques est, en général, simulée par une cinétique du premier ordre. La quantité d'élément chimique par unité de volume qui reste dans le sol au temps $(t+dt)$ s'écrit :

$$C(t + dt) = C(t) \times e^{-kdt} \quad (\text{IV.5})$$

Où, $C(t)$ et $C(t+dt) [ML^{-1}]$ sont les concentrations dans le volume considéré au pas de temps (t) et $(t+dt)$,

respectivement ; et $k = \frac{\ln 2}{t_{50}}$ est une constante de premier ordre estimée en fonction de la demi vie de la substance réactive.

g) Transport des solutés dans les modèles représentant la double perméabilité

Le transport des pesticides dans les sols structurés se caractérise par la concomitance de plusieurs modes de transport, que ce soit dans la matrice, dans les macropores ou entre ces deux compartiments. Le non-équilibre physique est engendré par le transfert des substances avec différentes vitesses dans les compartiments du sol qui se caractérisent par une mobilité différente. Certains modèles considèrent également le non-équilibre chimique, provoqué par un taux de sorption limité par une cinétique non instantanée. Les modèles simulant le transfert préférentiel des produits phytosanitaires sont majoritairement unidimensionnels. Les différentes approches adoptées ont été évoquées dans plusieurs revues, ainsi que dans des études de comparaison de modèles, par exemple, (Jarvis, 1998; Beulke *et al.*, 2001; Gårdenäs *et al.*, 2006; Šimunek and van Genuchten, 2008; Kohne *et al.*, 2009b).

A titre d'exemple, RZWQM (Ahuja, 1992; Ahuja *et al.*, 2000) qui est un modèle de gestion des systèmes agricoles, simule le transfert préférentiel des substances réactives en représentant plusieurs processus : par exemple, la dégradation suit une approximation de premier ordre ; la sorption est considérée uniquement dans la matrice ; le transfert des solutés entre la matrice et les macropores est modélisé suivant une diffusion latérale, et un mélange instantané entre deux compartiments de la matrice (constituée des micropores et mésopores) est supposé. RZWQM fournit des valeurs par défaut pour les paramètres essentiels pour la substance active de la plupart des pesticides commerciaux (Kohne *et al.*, 2009b).

Dans le modèle MACRO, le transfert latéral des solutés entre la matrice et les macropores est simulé en suivant une approximation de premier ordre de l'équation d'advection-diffusion (Jarvis, 1994b). Le modèle représente par ailleurs la sorption comme un équilibre instantané, mais permet de considérer une sorption cinétique dans la matrice pour un à deux types de sites de sorption. L'isotherme de Freundlich est considéré à la fois dans la matrice et les macropores, et le nombre total de sites de sorption est divisé en deux fractions, une pour chacun des deux domaines. La dégradation des pesticides est représentée par une cinétique d'ordre un, et peut être calculée séparément pour les phases solides et liquides, pour chacun des deux domaines. Les cinétiques de dégradation peuvent être ajustées en fonction de la température et d'humidité. Jarvis *et al.* (1997) ont développé MACRO_DB, une version bridée du modèle MACRO dédiée à la procédure d'homologation des substances actives, en reliant les bases de données des sols, les propriétés des pesticides, les données climatiques et les données de cultures à MACRO, et en y incluant des fonctions de pédotransfert.

Le modèle Hydrus (Šimunek *et al.*, 1998; Šimunek *et al.*, 2006b) inclut différentes approches pour conceptualiser le sol, telles que le concept Mobile-Immobile (MIM) et celui de la double perméabilité (DPM), suivant l'approche de Gerke and van Genuchten (1993a). Hydrus permet de représenter la biodégradation, et utilise une cinétique de dégradation d'ordre 1. Ces deux processus peuvent varier avec la profondeur dans le sol. Le modèle simule également, le transfert préférentiel de la molécule mère et de ses

métabolites. La sorption peut être décrite à l'aide des isothermes linéaires, de Freundlich, ou de Langmuir, avec un ou deux sites de sorption cinétique, et des paramètres qui peuvent varier en fonction des compartiments du sol. Le concept du multi-site de sorption peut être simulé suivant des approches cinétiques, irréversibles, et l'attachement détachement (Wehrhan *et al.*, 2007) des particules (Bradford *et al.*, 2003) et colloïdes (Šimůnek *et al.*, 2006a).

IV.3. Démarche suivie pour la modélisation du transfert des solutés

Nous avons présenté dans la partie précédente les processus qui régissent le devenir des pesticides, et les différentes approches adoptées pour les représenter en simple porosité ou en double perméabilité. Cette présentation n'est pas exhaustive, mais aborde les processus que l'on considère a priori comme les plus importants à prendre en compte pour aborder l'échelle des versants ou petits bassins versants agricoles.

Le transfert des substances non réactives est régi par l'équation de convection-dispersion. Par ailleurs, le transfert de solutés réactifs implique d'autres processus, comme l'interaction des substances avec le milieu poreux, ce qui engendre un retard dans le transfert, ou la dégradation. Seules des fonctions d'adsorption existent actuellement au sein de la plateforme de modélisation CMF ; la dégradation n'y est pas représentée de façon satisfaisante, comme nous l'évoquerons plus bas. Compte tenu des contraintes de temps, et malgré l'importance des processus de dégradation dans le devenir et le transfert des pesticides à l'échelle d'un versant, nous avons décidé de ne pas intégrer la représentation de la dégradation dans le cadre de la thèse, et de nous concentrer sur la représentation des processus de sorption. Dans le même souci de simplification, nous n'avons considéré que des isothermes de sorption linéaires dans cette première approche de simulation du transfert de soluté réactif dans CMF. La plateforme dans son état actuel permettrait toutefois de représenter également des isothermes de Freundlich.

Représentation du transport de solutés au sein de la plateforme CMF

Une équation de convection simple était déjà développée dans la plateforme CMF pour simuler le transport des solutés. La diffusion physique y est négligée, et seule la diffusion numérique est considérée. Dans le cas de la modélisation des solutés, on associe à chaque réservoir de stockage d'eau un réservoir de stockage de soluté « SoluteStorage », qui contient toutes les informations concernant les concentrations des substances simulées. Le modèle de transport de soluté dans CMF dispose d'un terme pour la représentation de la dégradation, via un filtre qui permet de retenir une fraction de substances transportées.

Le transport des solutés par convection consiste ainsi à faire migrer le soluté, en même temps que l'eau, à travers l'unité de surface et les couches de chaque maille. Il est représenté dans CMF en fonction de la quantité du traceur dans chaque volume fini « i », comme suit :

$$\frac{dX}{dt} = \sum_{f=1}^F (q_f [X]_f) + X_{in} - r^- X \quad (IV.6)$$

Où, X est la quantité du traceur dans chaque volume fini, F est le nombre de flux affectant le réservoir de stockage, q_f est un de ces flux d'eau [L^3/T], $[X]_f$ est la concentration de soluté dans le flux q_f , X_{in} est un flux de source/puit [M/T]; r^- est le coefficient de décroissance qui peut être associé à un filtre représentant la dégradation; une portion de la quantité de soluté transporté est alors retenue par ce filtre. Les concentrations dans CMF sont exprimées en unité de masse/ m^3 , où l'unité peut être exprimée par mol, mmol, Kg, g, mg ... etc.

Le terme source/puits, conçu pour permettre le couplage avec une fonction externe permettra plus tard de représenter des processus d'adsorption ou de dégradation. Le développeur P. Kraft ne recommande pas l'utilisation du terme de filtre car les tests qu'il a effectués mènent à des concentrations négatives. Ce point n'a pas été développé dans le cadre de cette thèse. Par ailleurs, contrairement à ce qu'il avait prévu à l'origine (cf le terme X_{in} dans l'équation IV.3), le développeur P. Kraft a pour l'instant choisi d'intégrer des isothermes d'adsorption directement au sein de la plateforme, et pas suivant un couplage externe. Ceci reste encore expérimental et pas encore validé dans CMF; c'est la raison pour laquelle nous avons choisi de tester la fonction la plus simple parmi les isothermes d'adsorption existant à l'heure actuelle, c.-à-d. la fonction d'adsorption linéaire, donnée dans ce qui suit :

$$\frac{X_{ad}}{m} = Kc \quad (IV.7)$$

Où, K [$L M^{-1}$] est le coefficient de sorption de Henry; $X_{ad} = X_{tot} - X_{free}$ est la masse adsorbée du traceur, X_{tot} [ML^{-3}] est la masse totale du traceur, X_{free} [ML^{-3}] est la masse dissoute du traceur et $c = X_{free}/V$ est la concentration du traceur [ML^{-3}], m est la masse de l'adsorbant (exprimée dans la même unité que la masse de traceur).

Ceci conduit à l'expression analytique suivante, qui sert à l'état initial, quand CMF stocke dans le réservoir de stockage de soluté la masse totale de traceur et doit calculer la masse du traceur libre :

$$X_{free} = X_{tot} \frac{V}{Km+V} \quad (IV.8)$$

Où, V [m^3] est le volume d'eau dans le réservoir de stockage.

La définition des conditions aux limites en solutés ou des concentrations à l'état initiale dans le sol se fait à l'aide des séries chronologique ou en associant une concentration spécifique pour les couches désirées. La *Figure 70* représente le schéma de notre modèle de transport de solutés : le transport de substances au sein de la plateforme est régi par la convection; un réservoir de soluté est associé à chaque réservoir d'eau. Les solutés sont donc entraînés par l'eau et suivent le même cheminement que celle-ci. Par exemple, R.Soluté.13 représente la concentration obtenue par l'isotherme linéaire sur la couche R.couche.13, qui est le réservoir représentant la 3^e couche de la 1^e colonne de sol. L'ensemble est transporté par convection suivant *Richards_lateral*.

La suite du chapitre présente une succession de tests de complexité croissante, et la confrontation des résultats obtenus avec ceux d'Hydrus sur des cas similaires. On utilisera les scénarios utilisés pour le transport de l'eau dans les précédents chapitres afin de ne pas multiplier les exemples de comparaison.

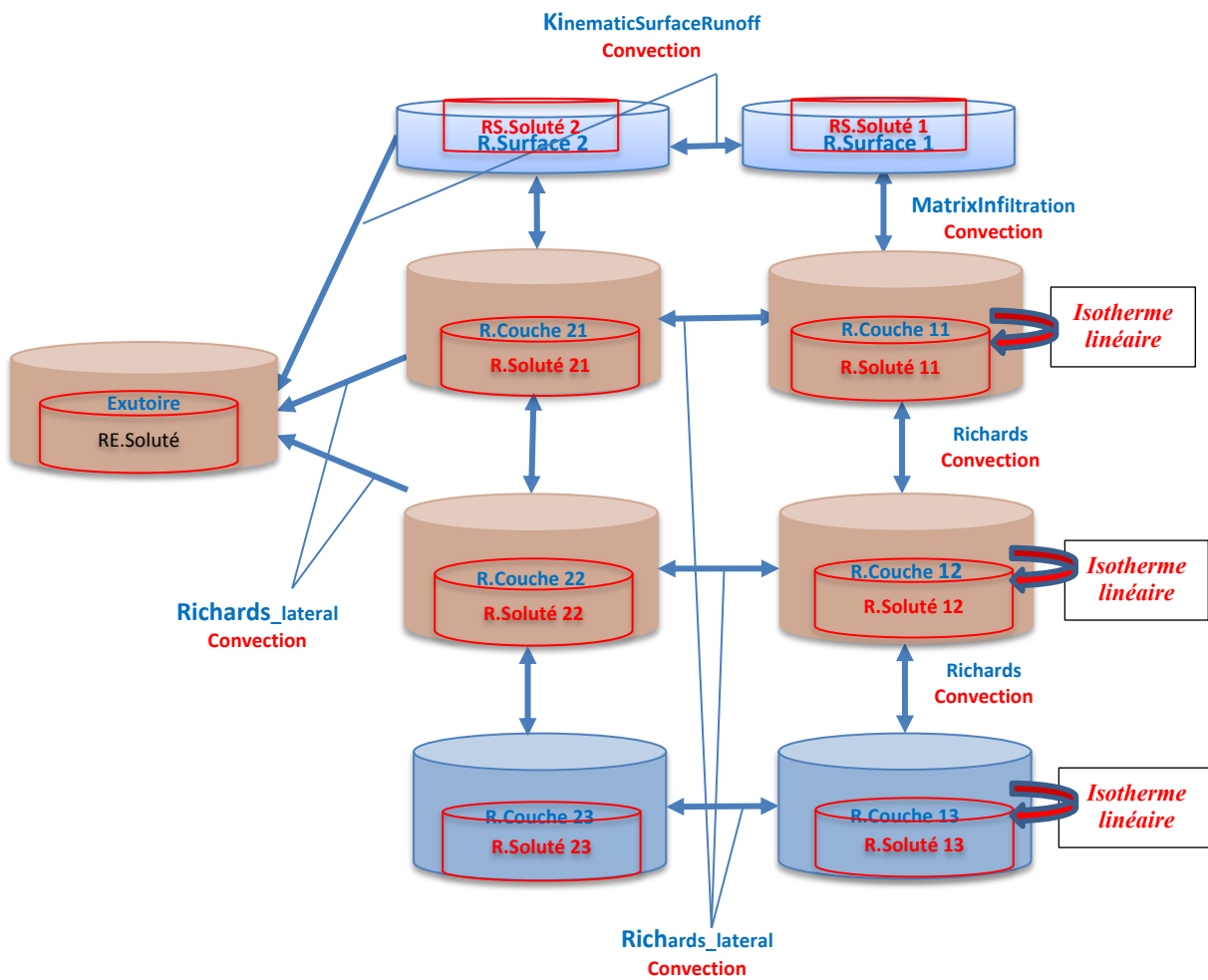


Figure 70 : Schéma de la conceptualisation du modèle de transport de solutés dans CMF.

Dans le cas d'une modélisation du transport de solutés qui prend en compte la double perméabilité, on associe dans CMF un réservoir soluté à chaque réservoir d'eau, que ce soit une couche du sol, un réservoir représentant les macropores ou un réservoir représentant un exutoire ou une nappe. Le transport est régi comme déjà évoqué par un modèle de convection et des représentations simplifiées de l'adsorption.

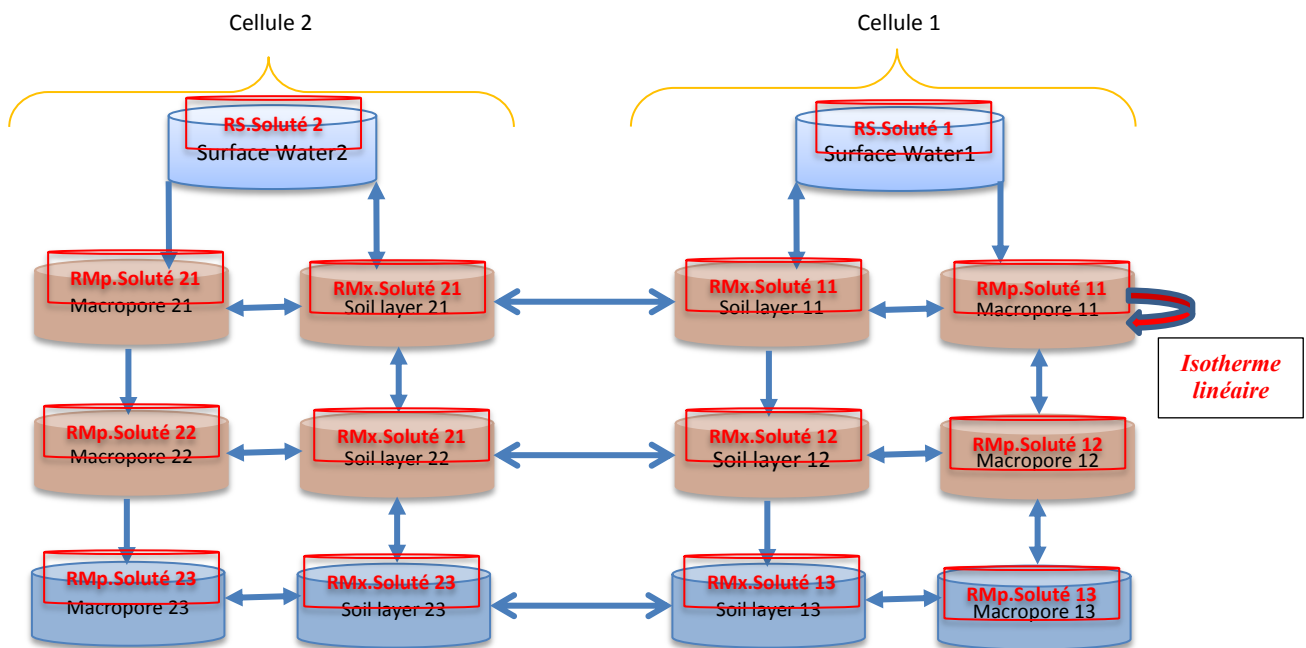


Figure 71 : Schéma de la conceptualisation du modèle de transport de solutés en 2D avec représentation de la Double Perméabilité dans CMF.

IV.4. Modélisation de transport des solutés non-réactifs en simple porosité

IV.4.1. Méthodologie

Afin d'évaluer la réponse de la plateforme de modélisation CMF en termes de transport de solutés, nous avons choisi de mener une simulation en simple porosité à l'échelle d'un profil du sol, puis à l'échelle d'un versant. Le scénario de transport de solutés en simple porosité simulé dans la première partie correspond à un profil 1D d'un sol limoneux-sableux présenté dans la section (II.2). Les résultats obtenus en termes de transport hydrique ont montré un flux similaire entre CMF et Hydrus1D dans le cas de la discrétisation à 1 cm dans CMF. Dans le cas de la modélisation de transport de solutés à l'échelle d'un versant, nous avons considéré le versant avec un sol homogène sableux-limoneux présenté dans la section (II.4.5). L'étude de transport d'un traceur sera menée tout en comparant avec Hydrus2D. La comparaison sera établie en spécifiant des points d'observation en surface et en subsurface. Ces simulations permettront de caractériser le transport au sein de CMF et d'en retirer un fonctionnement équivalent à Hydrus1D et 2D, si c'est possible.

Il est important de rappeler que ces deux modèles ne considèrent pas la même approche de transport de solutés. De plus, Hydrus dispose d'une interface permettant de choisir les paramètres souhaités, ce qui n'est pas le cas dans CMF. C'est la raison pour laquelle nous avons choisi de tester plusieurs paramètres pour le transport dans Hydrus suivant un modèle de convection-dispersion.

IV.4.2. Résultats et discussions

IV.4.1. 1. Modélisation unidimensionnelle

Les simulations sont menées sur un profil 1D de 1 m de profondeur. La discrétisation verticale considérée est de 1cm dans les deux modèles. Un flux d'eau constant de 20,8 mm/h est appliqué depuis le début de la simulation et jusqu'à 2,4 h. La durée totale de la simulation est de 0,6 jr (= 14,4 h). Une concentration d'un traceur de 3 mg/l est considérée en surface pendant la 1^{ière} heure de la simulation (62,4 g de traceur pour une surface de 1000 m²). Nous avons effectué la comparaison sur 3 points d'observation à différentes profondeurs (5 cm, 15 cm et 30 cm). Lors de la simulation du transport non-réactif, nous avons pris en compte les paramètres suivants pour la représentation de la dispersion dans Hydrus1D : une densité apparente $D_a = 1,5 \text{ g/cm}^3$ et une diffusivité moléculaire $D_{\text{diff}} = 1 \text{ cm}^2/\text{h}$. CMF ne considère aucun paramètre supplémentaire pour la représentation de la dispersion, il a donc fallu tester à quelle dispersivité de Hydrus correspond la dispersion numérique induite par CMF. Pour cela, nous avons testé deux valeurs de coefficient de dispersion longitudinale : $D_L = 1 \text{ cm}$ et $D_L = 10 \text{ cm}$ dans Hydrus1D dans le cas du transport non-réactif ainsi que trois discrétisations verticales différentes dans CMF, afin d'évaluer son effet sur la dispersion des substances au sein de la plateforme.

Les flux de solutés à différentes profondeurs pour les deux cas de coefficient de dispersion pris en compte sont illustrés dans les figures suivantes. Dans le cas de la discrétisation la plus fine dans CMF, on constate que les flux de soluté simulés par CMF sont comparables à ceux obtenus via Hydrus1D à proximité de la surface (5 cm), notamment dans le cas où $D_L = 1 \text{ cm}$, avec une légère surestimation du pic de concentration dans CMF. Une sous-estimation est observée en subsurface (15 cm et 30 cm) dans CMF par rapport à celle données dans Hydrus1D avec un retard dans le temps de pic dans CMF. On observe par ailleurs, qu'un coefficient de dispersion plus important dans Hydrus1D ($D_L = 10 \text{ cm}$, *Figure 73*) engendre un pic de concentration en avance par rapport au premier cas ($D_L = 1 \text{ cm}$, *Figure 72*), analogue à celui donné par CMF. Par ailleurs, une discrétisation grossière dans CMF engendre une dispersion plus lente en surface et en subsurface par rapport aux concentrations données dans Hydrus1D, pour les deux coefficients de dispersion considérés dans Hydrus. On note que CMF ne permet d'accéder en sortie qu'aux concentrations des différents réservoirs de stockage, qu'il s'agisse d'une couche de sol ou un réservoir de surface. De plus, la précision des sorties en solutés arrondit à des valeurs nulles dans le cas de faible valeurs de concentration. C'est la raison pour laquelle, nous n'avons pas pu comparer les flux de soluté en bas de profil de sol.

On constate que le bilan de masse est bien bouclé dans CMF, comme illustré dans le *Tableau 20*. On souhaite souligner que plusieurs valeurs de diffusion moléculaire ont été testées également pour Hydrus dans cette partie (plus fortes : $D_{\text{diff}} = 10 \text{ cm}^2/\text{h}$ comme plus faibles : $D_{\text{diff}} = 0,1 \text{ cm}^2/\text{h}$, que la valeur nominale). Nous avons constaté que la diffusion moléculaire avait un effet négligeable par rapport à la dispersion. Ainsi, les paramètres utilisés en simple porosité avec une dispersion longitudinale de 1 cm dans Hydrus1D mènent à des réponses comparables entre les deux modèles. Nous testons donc ces mêmes paramètres dans Hydrus lors de la deuxième étape de transport non-réactif dans CMF en deux dimensions, à l'échelle d'un versant.

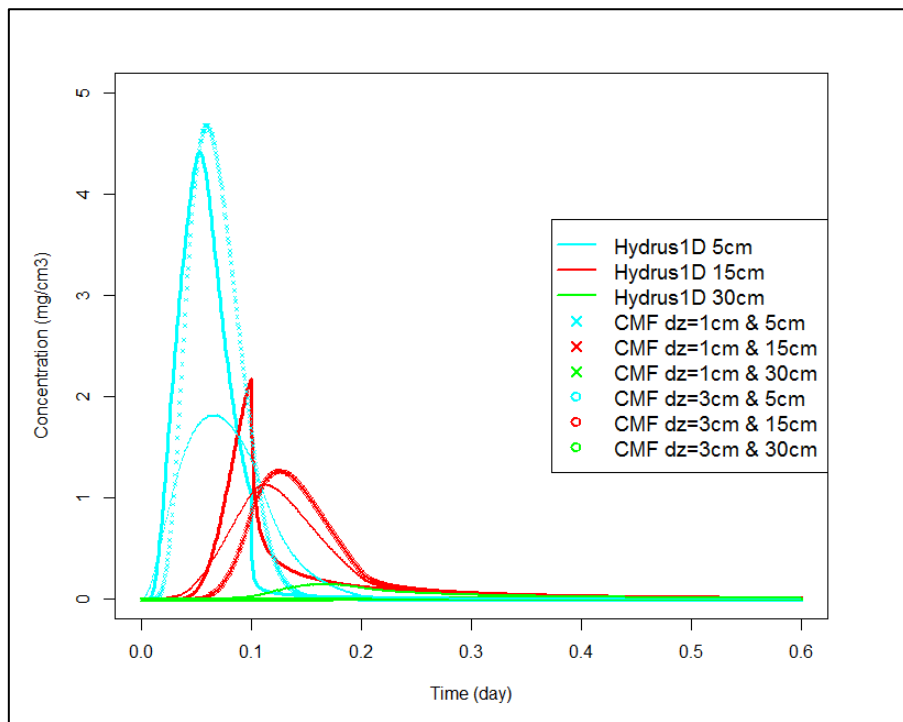


Figure 72 : Flux de traceur à différentes profondeurs dans CMF et Hydrus1D - $D_L = 1$ cm.

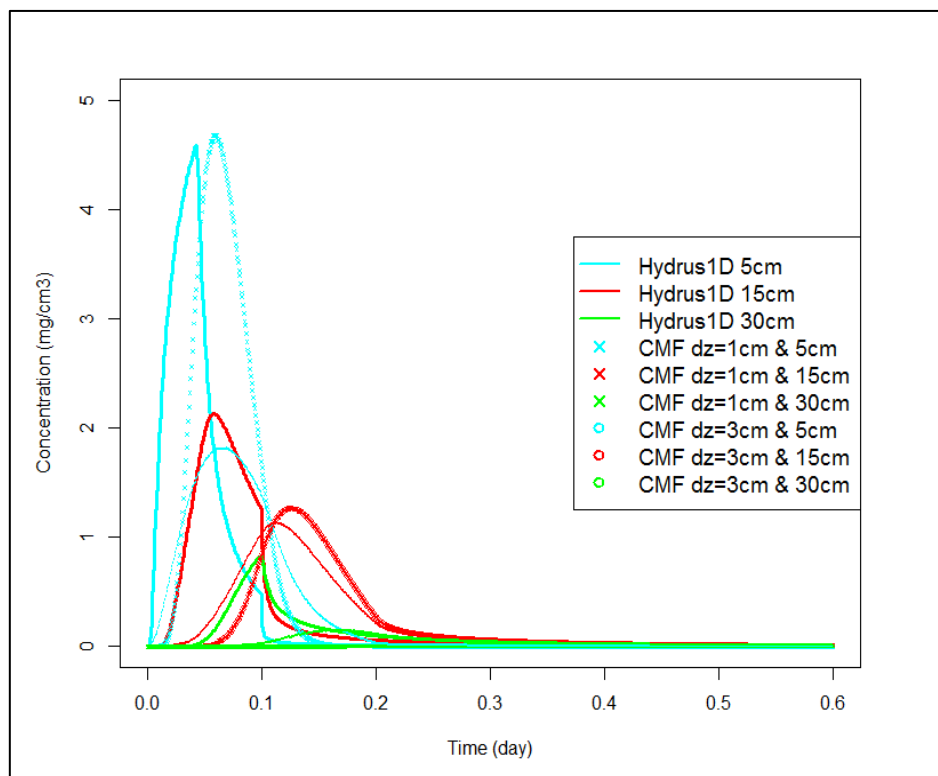


Figure 73 : Flux de traceur à différentes profondeurs dans CMF et Hydrus1D- $D_L = 10$ cm.

IV.4.1.2. Modélisation en deux dimensions

La deuxième étape d'évaluation de la réponse de CMF pour le transport de substance en simple porosité a été menée à l'échelle d'un versant. Nous avons choisi le versant ayant un sol limoneux-sableux présenté dans la section (II.4.3). Dans le cadre de cette simulation, nous avons représenté le transport d'un traceur par convection en appliquant une concentration de 1 mg/l dans les deux modèles pendant 3 h depuis le début de l'évènement pluvieux (puis un rinçage avec de l'eau propre pendant 8 h). Cet évènement a une intensité de 2mm/h pendant 11 h et commence 24 h après le début de la simulation. La concentration est définie en même temps que les conditions atmosphériques dans les deux modèles (288 g de traceur pour une surface de 16000 m²). Les paramètres de transport de substances considérés dans Hydrus2D lors de cette simulation sont : une densité apparente $D_a = 1,5 \text{ g/cm}^3$; une dispersion transversale $D_T = 1 \text{ cm}$; une dispersion longitudinale $D_L = 1 \text{ cm}$ et une diffusivité moléculaire $D_{\text{diff}} = 1 \text{ cm}^2/\text{h}$. Nous avons considéré plusieurs points d'observation, permettant d'avoir une vue d'ensemble du transport à l'échelle d'un versant (*Figure 74*) ; 3 en surface, et 3 à 3cm de la surface, répartis en haut, au milieu et en bas de versant.

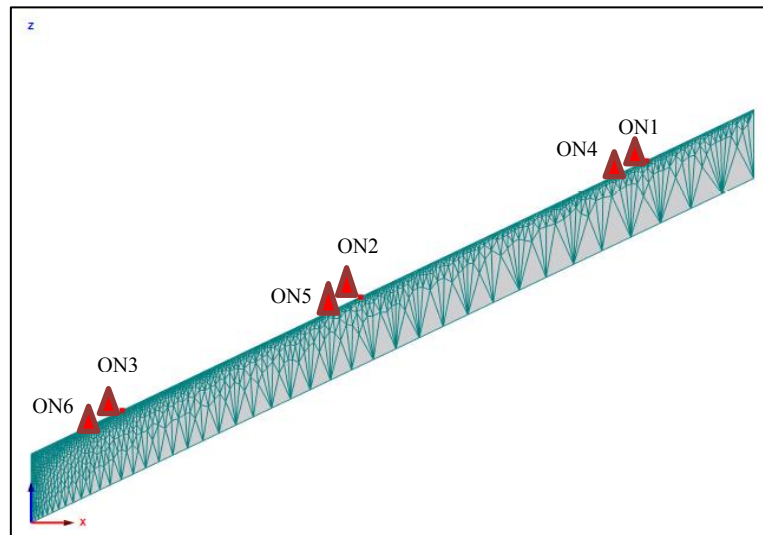


Figure 74 : Représentation du versant dans Hydrus2D avec les points d'observation.

Les résultats en terme de transfert hydrique, présentés dans la section (II.4.3), ont montré des flux similaires à l'exutoire de versant entre les deux modèles avec une légère surestimation de pic de flux dans CMF. A propos des concentrations estimées dans les différents points d'observation, on remarque que la concentration à la surface du versant est identique sur tout le versant dans CMF et c'est ce qu'on prévoit comme réponse à l'échelle d'un versant. En outre, elle est surestimée par rapport à celle observée en surface du versant dans Hydrus2D. Un léger décalage est observé dans les pics de concentration des points d'observation de surface du versant dans Hydrus2D par rapport à CMF ce qui probablement dû au maillage triangulaire adopté où la concentration de l'élément qui est en partie un peu éloignée de la surface (*Figure 75*). Pour ce qui concerne le transport de substances en subsurface, les résultats illustrés dans la *Figure 76*, montrent une sous-estimation des concentrations en haut et en milieu de versant ce qui peut être expliqué

par le ressuyage rapide que nous avons observé en haut de versant dans Hydrus2D. Cependant, les concentrations sont proches au milieu de versant. Les concentrations dans CMF varient entre sous-estimé en début de simulation par rapport à Hydrus2D et surestimés en fin de simulation en bas de versant, sans doute par suite de l'influence de la condition à la limite aval. Le *Tableau 20* montre que le bilan de masse est bien bouclé dans CMF, même s'il se dégrade lorsque l'on passe en 2D, s'approchant de 1%.

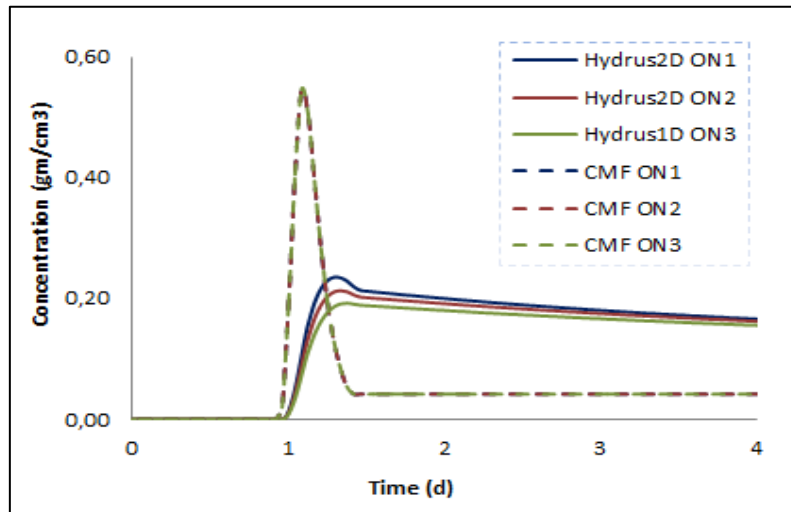


Figure 75 : Concentration dans les points d'observation de surface dans CMF et Hydrus2D dans le cas $D_L=1cm$.

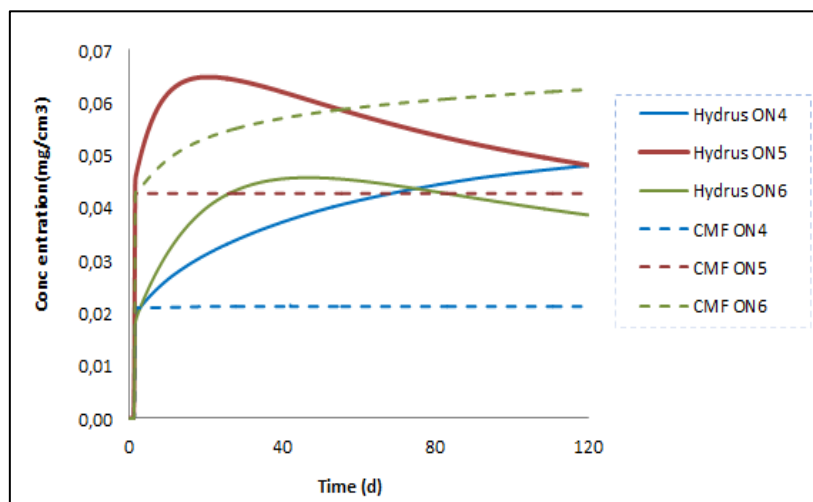


Figure 76 : Concentration dans les points d'observation de subsurface dans CMF et Hydrus2D.

Tableau 20 : Bilans de masse dans CMF et Hydrus1D dans le cas du transport non-réactif et réactif.

Bilan de masse	CMF	Hydrus1D
Modélisation 1D ¹⁵	0,27 %	D _{LM} = 1cm : 0,0006 % D _{LM} = 10 cm : 0,0008 %
Modélisation 2D	0,88 %	0,32 %

IV.4.2. Conclusion

L'objectif de cette première étude de transport de solutés, à l'échelle d'un profil du sol puis d'un versant était de caractériser le transport non-réactif dans CMF. Les simulations 1D menées sur un profil du sol, pour le transport par dispersion-convection dans Hydrus1D et convection dans CMF, ont montré que les concentrations et leur dynamique sont proches dans les deux modèles, pour un coefficient de dispersion $D_L = 1$ cm pour Hydrus, pour ce sol limoneux-sableux. Ce coefficient a alors été pris en compte dans le cas de la modélisation en deux dimensions et a permis de confirmer nos conclusions : globalement, les deux modèles conduisent à des résultats similaires, pour un coefficient faible de dispersion ($D_L = 1$ cm), notamment pour le temps d'atteinte du pic de concentration en surface, alors qu'on a remarqué un retard pour CMF en subsurface. Une surestimation des concentrations en subsurface est observée dans CMF ; elle a été expliquée par la différence de l'état d'humidité des systèmes modélisés, que soit en 1D ou en 2D.

Une différence majeure est qu'Hydrus dispose de plusieurs paramètres pour la caractérisation du transport, alors que CMF, qui s'appuie sur une approche simplifiée, ne permet l'entraînement des substances que par convection. Toutefois, si les résultats ont montré une influence des coefficients choisis pour la dispersivité, la variation de la diffusion moléculaire dans ce cas de milieu à simple porosité et de traceur non réactif n'a pas montré d'effet significatif.

La plateforme dispose théoriquement de plusieurs fonctionnalités permettant de représenter au mieux le système tel que se le représente le modélisateur. L'application d'une condition à la limite en solutés au même temps qu'une condition à la limite pour l'eau ne fonctionne pour l'instant qu'avec des conditions atmosphériques (concentration de soluté imposée dans le flux imposé à la surface). Des tests supplémentaires, en adoptant d'autres types de conditions aux limites sont nécessaires pour permettre plus de souplesse à l'utilisateur pour décrire le système tel qu'il le conçoit.

$$^{15} BMS = \frac{(C_{entrée} \cdot V_{entrée}) - (C_{sortie} \cdot V_{sortie} + C_{stock} \cdot V_{stock})}{C_{entrée} \cdot V_{entrée}} \times 100$$

Où, $C_{entrée}$, C_{sortie} et C_{stock} [ML^{-3}] sont les concentrations de soluté à l'entrée du système, en sortie et en stock, respectivement ; $V_{entrée}$, V_{sortie} et V_{stock} [L^3] est le volume d'eau en entrée, en bas du profil et stocké dans le sol, respectivement.

Nous avons lors de cette étape caractérisé le transport non-réactif dans un profil 1D puis un à l'échelle d'un versant, et nous avons pu définir des conditions aux limites en soluté dans CMF (et une paramétrisation du transfert dans Hydrus) qui permettent de conduire à des résultats proches de ceux produits par Hydrus1D/2D. L'étape suivante consiste à simuler des substances réactives suivant une convection dans CMF et une convection-dispersion dans Hydrus2D, en simple porosité d'abord, puis en double perméabilité.

IV.5. Transport des substances réactives dans CMF

IV.5.1. Modélisation du transport en simple porosité

Nous avons choisi le scénario 1D présenté dans la section précédente (IV.4.1.), pour simuler cette fois-ci un transport réactif, où on considère une adsorption linéaire. La substance modélisée est le diméthomorphe ($C_{21}H_{22}ClNO_4$), qui est un fongicide appartenant au groupe chimique des dérivés de l'acide cinnamique, qui a une capacité d'adsorption modérée. Nous avons pris en compte un coefficient de sorption égal à $K = 3,26 \text{ cm}^3/\text{g}$ dans les deux modèles. Nous avons testé plusieurs variantes de combinaison entre les coefficients de dispersion et la diffusion moléculaire dans Hydrus, afin de mieux cerner la réponse de CMF pour des substances réactives malgré le fait que le coefficient de diffusion moléculaire est intrinsèque à la molécule et aux propriétés chimiques du solvant. On précise que cette étude est simplement une tentative de couplage avec quelques essais pour mieux comprendre la représentation des processus de transfert au sein de CMF. Le *Tableau 21* présente les différentes variantes testées où on teste trois valeurs pour le coefficient de dispersion : 1cm, 10 cm et 20 cm. Pour la comparaison, on considère 3 points d'observation à différentes profondeurs dans les deux modèles (5 cm, 15 cm et 20 cm). Le coefficient de diffusion moléculaire a été pris égal à $0,1 \text{ cm}^2/\text{h}$ sauf pour le cas de la première variante où les concentrations étaient très faibles dans Hydrus1D, ce qui nous a orienté à reproduire ce test avec un coefficient plus important ($D_{\text{diff}} = 10 \text{ cm}^2/\text{h}$).

Tableau 21 : Variantes de coefficients de dispersion et de diffusion testées dans cas du transport réactif en simple porosité.

Variantes	Dispersion longitudinale	Diffusion moléculaire
Variante (1)	1 cm	$10 \text{ cm}^2/\text{h}$
Variante (2)	10 cm	$0,1 \text{ cm}^2/\text{h}$
Variante (3)	20 cm	$0,1 \text{ cm}^2/\text{h}$

Les résultats montrent que les flux de soluté sont similaires dans Hydrus1D pour le cas des deux variantes (1) et (3) où les flux de soluté sont sous-estimés dans CMF sur tout le profil dans le cas de la 3^{ème} variante (Figure 79). Ceci peut être dû au coefficient de dispersion important pris en compte lors de la variante (3) et qui ne favorise pas beaucoup d'adsorption ou la combinaison entre un coefficient de dispersion faible et la prise en compte de la diffusion moléculaire (Figure 77). En outre, les flux de soluté sont surestimés dans CMF dans le cas de la 2^{ème} variante (Figure 78) par rapport aux flux donnés dans Hydrus1D. On voit que la recherche de résultats comparables pour CMF et Hydrus1D conduit à varier significativement le coefficient de diffusion moléculaire dans Hydrus1D, en fonction du coefficient de dispersion considéré, dans des gammes qui peuvent poser question du point de vue de leur sens physique. Dans ces conditions, on peut considérer que le modèle de transport de solutés réactifs dans CMF, en supposant une adsorption linéaire, conduit à des résultats proches de ceux de Hydrus1D pour les deux variantes (1 et 3).

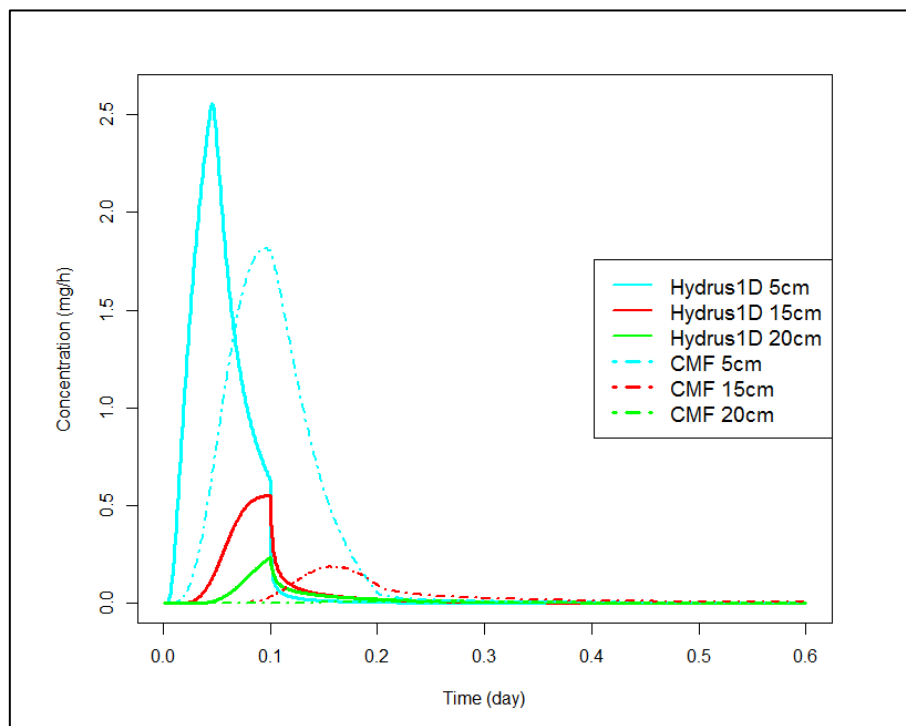


Figure 77: Flux de soluté à différentes profondeurs dans CMF et Hydrus1D dans le cas de la variante (1).

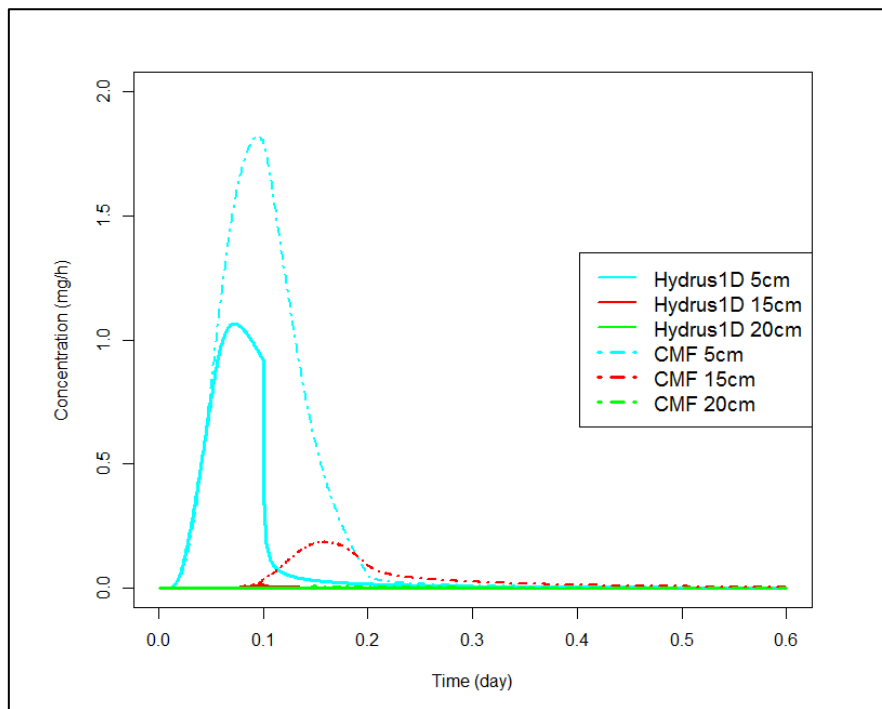


Figure 78 : Flux de soluté à différentes profondeurs dans CMF et Hydrus1D dans le cas de la variante (2).

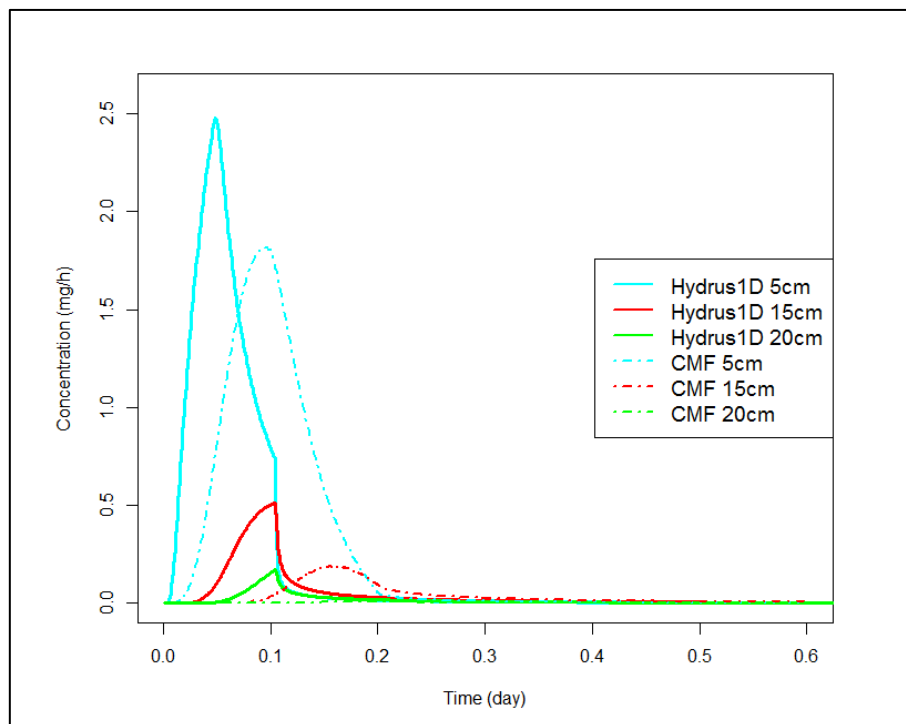


Figure 79 : Flux de soluté à différentes profondeurs dans CMF et Hydrus1D dans le cas de la variante (3).

IV.5.2. Modélisation du transport en double perméabilité

Nous avons également voulu effectuer un premier test du transport des solutés dans CMF suivant l'approche à double perméabilité développée dans le cadre de cette thèse. Nous avons en ce sens mené des simulations en une dimension avec le module double perméabilité. En suivant toujours la même logique de nous baser sur des scénarios déjà testés dans les chapitres précédents, nous nous sommes inspirés des cas étudiés dans le chapitre III, en y ajoutant le transport des solutés et une adsorption linéaire. L'exemple choisi correspond au profil du sol sableux-limoneux présenté dans la section (III.6.2). Conformément au fil directeur suivi tout au long de ce manuscrit, toutes les simulations sont comparées avec Hydrus1D pour ce cas d'étude. Comme dans le cas des simulations en simple porosité, nous avons modélisé le transfert du diméthomorphe ($C_{21}H_{22}ClNO_4$) dans un profil 1D de sol de 40 cm de profondeur. Les conditions initiales et aux limites sont présentées dans la section (III.6.2) : on considère un flux nul en bas de profil et une pluie en créneau de 3 mm/h pendant 4 h, depuis le début de la simulation. Les paramètres pris en compte dans Hydrus1D sont :

- dans la matrice : $K_{sat} = 0,66$ mm/h ; $D_a = 1,5$ g/cm³ et $D_{diff} = 1$ cm²/h et deux valeurs de coefficient de dispersion longitudinal: $D_{LM} = 1$ cm et $D_{LM} = 10$ cm.
- dans les macropores, on considère le coefficient de dispersion $D_{LF} = 20$ cm.

Ainsi, deux scénarios sont simulés dans Hydrus1D. De la même façon, deux scénarios sont testés dans CMF, en adoptant les deux fonctions d'échanges *PhilippMME* ($\omega = 3$) et *JarvisMME*. L'événement pluvieux est de 3 mm/h pendant les 2 premières heures de la simulation. Les concentrations appliquées en surface sont de 4 mg/l pendant les deux premières heures de la simulation. On a donc par la suite 3 mm/h d'eau propre appliqués dans les 2 h qui suivent.

Les résultats montrent que la fonction d'échange considéré dans CMF n'a pas d'effet significatif sur les flux de soluté en surface de la matrice ainsi que en surface des macropores. Les flux de soluté en surface sont sous-estimés dans CMF par rapport à ceux donnés dans Hydrus1D- $D_{LM} = 1$ cm au début de la simulation. Par ailleurs, CMF surestime les flux de soluté par rapport à Hydrus1D- $D_{LM} = 1$ cm à l'activation de l'infiltration dans les macropores. Une sous-estimation des flux de soluté a été observée pour CMF et Hydrus1D où le coefficient de dispersion est faible, par rapport aux flux simulés dans Hydrus1D où $D_{LM} = 10$ cm. Ils sont plutôt proches au flux simulés dans Hydrus1D pour le cas de faible coefficient de dispersion ($D_{LM} = 1$ cm). Un peu de retard est observé dans le temps de pic de flux dans CMF avec une décreue plus lente (*Figure 80*). La *Figure 81* illustre les flux de soluté en bas de profil dans CMF suivant les deux fonctions de transfert et Hydrus1D. On remarque que les flux de soluté sont nuls dans Hydrus1D pour les deux coefficients de dispersion étudiés. Une différence dans l'allure des flux de soluté a été observée en bas de profil dans entre les simulations menées avec les deux fonctions d'échange. Ceci peut être expliqué par la différence des transferts en subsurface dans CMF via les deux fonctions *PhilippMME* ($\omega = 3$) et *JarvisMME*.

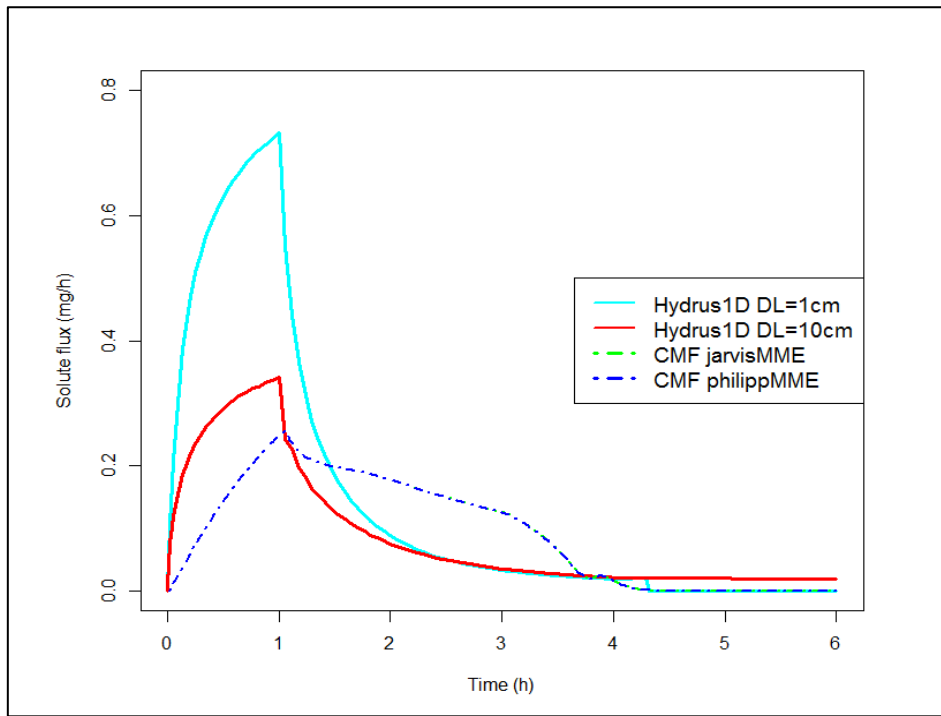


Figure 80 : Flux de soluté en surface de la matrice dans CMF et dans Hydrus1D.

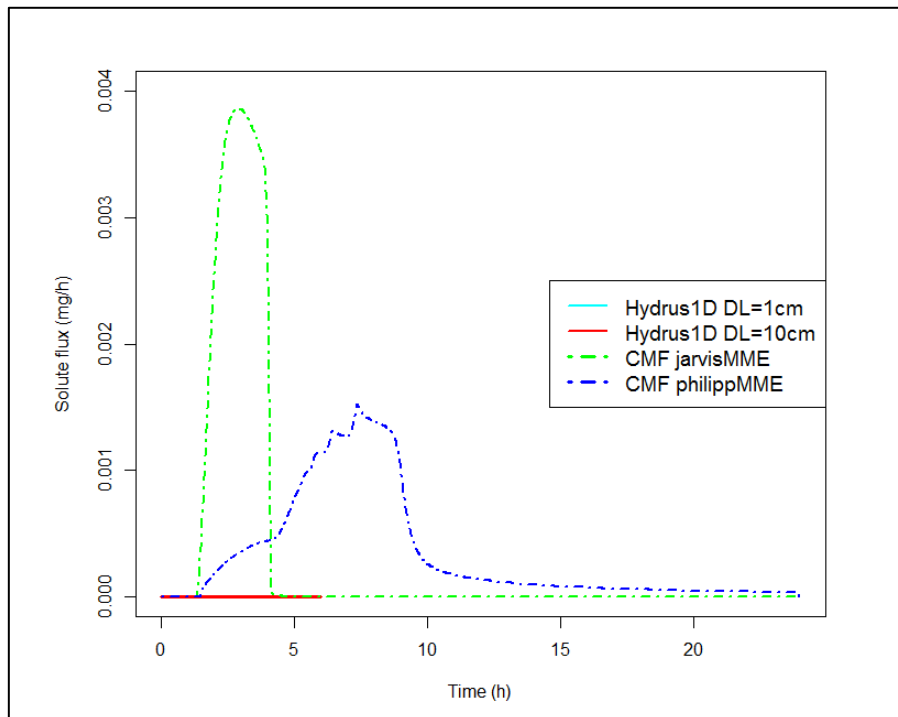


Figure 81 : Flux de soluté en bas de profil de la matrice dans CMF et Hydrus1D.

Tableau 22 : Bilans de masse dans CMF et Hydrus1D dans le cas du transport réactif.

Bilan de masse	CMF	Hydrus1D
Simple porosité	0,4 %	V1 : 0,001 % V2 : 0,002 % V3 : 0,001 %
Double perméabilité	<i>PhilipMME</i> : 0,73 % <i>JarvisMME</i> : 0,91 %	$D_{LM} = 1\text{cm}$: 0,001 % $D_{LM} = 10\text{cm}$: 0,002 %

IV.5.1.3. Conclusion de la modélisation du transport réactif dans CMF

Nous avons présenté dans cette section le transport de substances réactives (au sens de substances sujettes à l'adsorption, la dégradation n'ayant pas été simulée) d'abord en simple porosité, puis en double perméabilité au sein de la plateforme de modélisation CMF. Lors de ces simulations, nous avons considéré une adsorption linéaire en simple porosité et en double perméabilité dans les deux modèles CMF et Hydrus1D. Les simulations menées sur le transport réactif dans CMF en simple porosité ont montré l'intérêt de la prise en compte de la diffusion moléculaire dans Hydrus1D lors de la dispersion pour aboutir à une réponse proche entre les deux modèles. Dans le cas de double perméabilité, les résultats ont montré que le transfert des substances est comparable à Hydrus1D pour un faible coefficient de dispersion ($D_L = 1\text{cm}$), notamment pour le temps d'atteinte du pic des flux de soluté en surface. Par ailleurs, une sous-estimation des flux de soluté a été observée dans CMF par rapport à ceux simulés par Hydrus1D en considérant les deux coefficients de dispersion : $D_{LM} = 1\text{ cm}$ et $D_{LM} = 10\text{ cm}$. Les flux de soluté en bas de profil sont plus importants dans CMF que Hydrus1D et encore les simulations menées suivant la fonction d'échange *JarvisMME* par rapport à celles menées suivant la fonction d'échange *PhilipMME*. Ceci peut être en grande partie attribué à la différence de l'état hydrique entre les deux modèles. Il reste encore de nombreux tests à faire pour approfondir la compréhension du comportement de CMF en double perméabilité vis-à-vis du transport de solutés.

Conclusion

Ce chapitre a été consacré à la modélisation du transport des substances au sein de la plateforme CMF. La caractérisation du transport des solutés a été menée en simple porosité et en double perméabilité, en utilisant notre nouveau modèle DP. L'objectif était de montrer la faisabilité d'ajouter les solutés dans la plateforme qui a été validée au niveau hydrologique de façon rigoureuse.

La modélisation en simple porosité a été focalisée sur le transport par convection d'un traceur à l'échelle d'un versant. Les résultats ont montré une différence dans la réponse de CMF et Hydrus2D en termes de transport de substances non-réactives. Cette différence peut en grande partie être expliquée par la représentation adoptée dans chaque modèle : Hydrus2D suit un modèle de dispersion-convection alors que CMF représente un transport par convection et ne considère qu'une diffusion numérique. Deux paramètres de coefficient de dispersion longitudinale ont été testés pour Hydrus, une valeur de 1 cm permettant de donner une réponse proche de celle de CMF, pour le scénario considéré.

Dans une deuxième étape, nous avons modélisé le transport des substances réactives, d'abord en simple porosité, puis en double perméabilité, sur un profil 1D de sol. Pour le transport réactif, nous avons adopté une adsorption linéaire dans les deux modèles. Les résultats ont permis de mettre en évidence une différence de la réponse des deux modèles tant en surface qu'en subsurface. Cette différence a été également identifiée dans le cas de la modélisation du transport d'un pesticide dans un modèle 2D de versant ; elle pourrait être due à la prise en compte de l'adsorption dans chaque modèle ainsi qu'à la discrétisation qui rend la comparaison pas similaire. Les différences existantes entre les réservoirs de stockage, qui représente l'état d'une couche numérique dans CMF, et des éléments triangulaires dans Hydrus2D qui représente d'une certaine façon le subsurface intervient dans l'interprétation des résultats.

Nous n'avons pas pu comparer les échanges en solutés entre les deux compartiments du sol, que ce soit suivant un transport de substances non-réactives ou de substances réactives : la structure de la plateforme ne le permet en effet pas. CMF n'autorise que l'accès à la concentration des réservoirs de stockage (donc de type WaterStorage) ; comme les transferts entre les différents réservoirs se font via des flux de connexion (donc de type flux_connection), nous n'avons pas les éléments nécessaires pour la comparaison.

A ce stade, nous disposons donc maintenant par conséquent d'un modèle à une et deux dimensions, en simple ou double perméabilité, et qui englobe certains des processus influençant le transfert de l'eau à l'échelle d'un versant (il manque d'autres processus et en particulier la dégradation). Le modèle représente notamment le ruissellement, ce que ne fait pas Hydrus2D, ni un autre modèle bi-dimensionnel à double perméabilité disponible à l'heure actuelle.

La faisabilité de faire tourner ce modèle sur cas très simples a été démontrée, cependant il reste à réaliser de nombreuses autres simulations, en faisant varier les paramètres décrivant le transport par dispersion-convection d'une part (dans Hydrus 1D) et l'adsorption d'autres part (dans les deux modèles),

afin de pouvoir mieux juger des équivalences entre les deux modèles et de cerner pour quels paramètres utilisés dans Hydrus2D conduisent à une réponse similaire à celle de CMF. La validation devra aussi aborder d'autres types de sols, homogènes et hétérogènes.

D'autres représentations de l'adsorption, pourront également être testées, et une représentation de la dégradation intégrée. Par ailleurs, la confrontation de ces modèles de complexité croissantes à des expérimentations permettra de mieux caractériser le comportement de notre modèle, de pouvoir valider la représentation qu'il fait de la réalité, et de déterminer les améliorations à apporter, à court et long termes.

Conclusion générale

Conclusion générale

V.1. Rappel de la démarche

Cette thèse a été menée dans l'objectif d'améliorer la représentation et la compréhension des processus liés au transfert des produits phytosanitaires sur un versant, en adoptant une approche simplifiée de modélisation spatialisée. Pour ce faire, nous avons choisi d'intégrer les processus que l'on suppose dominants à l'échelle d'un versant dans une plateforme hydrologique qui serait « orientée-processus », modulaire, évolutive, et open source. Une telle démarche nous paraît en effet permettre d'adapter un modèle aux particularités d'un bassin versant donné, tout en restant raisonnable en terme de temps de calcul, et capable d'évoluer au fur et à mesure des connaissances.

Une première partie de la thèse a consisté à faire une importante recherche bibliographique sur les outils de modélisation spatialisée en hydrologie et qualité de l'eau. Cette première étape d'étude des principaux modèles existants répondant à notre cahier des charges est décrite dans le chapitre I, et a mené au choix de CMF (Catchment Modeling Framework). Cette plateforme, permettant de combiner modélisation conceptuelle et lois physiques, nous a semblé pertinente pour représenter les processus influençant le devenir des pesticides. CMF est basée sur une représentation capacitive des processus, en reliant les réservoirs de stockage et les conditions aux limites par des flux de connexion pour représenter le routage des flux en surface et en subsurface entre ces réservoirs.

La plateforme CMF, composée de code C++ et de Python, est un outil relativement complexe à prendre en main et ses cas d'application sont encore assez rares. C'est pourquoi la validation de l'existant à notre échelle de travail (le versant) a été menée progressivement et toujours en le comparant à un autre modèle publié :

- un cas-test simple d'infiltration en une dimension, confronté à Hydrus1D ;
- puis un benchmark publié de versant simple pour étudier son comportement sur le ruissellement en le comparant avec Cathy pour deux types de ruissellement (hortonien et par saturation du profil de sol) ;
- enfin, la validation des transferts de subsurface sur un versant connecté à un cours d'eau avec un sol homogène proche de celui du site expérimental de la Morcille, comparé avec Hydrus2D.

La plateforme a ainsi été validée en partie par comparaison aux modèles, montrant que CMF est relativement fiable pour la caractérisation de la réponse hydrologique, tout au moins sur des versants simplifiés en géométrie et pédologie. Cependant, les différences existant entre les modèles en terme de représentation des processus hydrologiques, les conditions aux limites ainsi que la discrétisation et la résolution numérique rendent non triviale la comparaison et la production de systèmes hydrologiques similaires.

Avant d'entamer la modélisation du transport de solutés, consciente du rôle primordial que joue ce processus sur le devenir des pesticides, j'ai choisi d'intégrer la représentation du transfert préférentiel au sein de CMF. Le modèle à double perméabilité choisi se base sur les fonctions déjà validées pour la représentation des flux dans la matrice, et respecte la représentation conceptuelle de CMF, en s'appuyant sur la définition d'un nouveau réservoir de stockage dédié à la représentation des macropores. Des fonctions d'infiltration en surface et de percolation dans les macropores, et des fonctions d'échange de macropores à matrice ont été développées.

Enfin, le transport de solutés est régi dans CMF suivant une équation de convection que nous avons implémentée et testée en simple porosité et en double perméabilité. Nous y avons adjoint l'isotherme d'adsorption linéaire pour les solutés réactifs. Dans la même logique que la partie hydrologique, les modèles construits avec CMF ont été testés et validés par comparaison à Hydrus (1D, 2D, simple puis double perméabilité, ...), en s'appuyant toujours sur les mêmes scénarios de base et en y ajoutant progressivement de la complexité du point de vue des processus simulés..

V.2. Résultats et « non-résultats »

La comparaison avec Hydrus1D sur un profil du sol a permis de caractériser la façon dont CMF gère l'infiltration en surface et la percolation à travers les couches du sol. Lors de cette étude, nous avons pu tester l'effet de différents types de conditions aux limites et de la discrétisation verticale sur la réponse de CMF. Les résultats ont montré la sensibilité de CMF à l'épaisseur des couches numériques, sa réponse étant similaire à celle de Hydrus1D dans le cas des discrétisations fines.

Cette qualification du comportement de CMF s'est poursuivie à l'échelle du versant, en confrontant ses simulations à celles du benchmark de Sulis *et al.* (2010). Ce test sur le benchmark de genèse du ruissellement par excès de saturation et par excès d'infiltration a permis d'identifier que les fonctions de ruissellement pré-existantes ne sont pas adaptées pour le ruissellement sur le versant : elles sont à réserver à l'écoulement concentré à surface libre. Par conséquent, une nouvelle fonction a été développée et testée à l'échelle d'un versant. La comparaison attentive des résultats obtenus avec CMF et avec le modèle Cathy (qui résout l'équation de Richards en 3D) et l'incapacité constatée à faire coïncider les conditions initiales utilisées par les deux modèles ont permis de mettre en évidence la nécessité d'apporter des corrections à la définition des conditions initiales dans CMF. Elle a aussi mis en évidence une anisotropie systématique de la conductivité hydraulique dans CMF, même dans un sol supposé isotrope. Cette phase a également conduit à apporter une

modification à la fonction d'infiltration en surface, afin qu'elle soit régie par la conductivité hydraulique à saturation, et non plus par la moyenne géométrique des conductivités des premières couches. Cette évolution a permis de corriger la situation, qui conduisait à des infiltrations excessivement faibles dans les sols sableux secs, notamment pour une nappe à 1 m de profondeur. Là aussi les résultats ont confirmé la sensibilité de CMF à la discrétisation verticale : une réponse similaire à celle de Cathy est obtenue si les épaisseurs des couches numériques sont suffisamment fines, notamment à proximité de la surface.

La dernière étape de caractérisation de la plateforme a été menée en comparant la réponse de CMF avec Hydrus2D sur un versant ayant un sol homogène, pour plusieurs types de sol, en focalisant l'étude sur un modèle CMF où le transfert latéral est régi par l'équation de *Richards*. Une réponse similaire a été obtenue entre les deux modèles dans le cas du sol sableux-limoneux. Toutefois, nous avons observé une sous-estimation du débit à l'exutoire pour un sol inspiré de celui du site de la Morcille, qui est un sable argileux beaucoup plus perméable.

Compte tenu de la différence de conceptualisation de CMF et Hydrus2D, il n'était pas trivial de considérer des conditions à la limite avale du versant équivalentes pour chaque modèle, ce qui a compliqué la comparaison des scénarios modélisés via CMF et Hydrus2D. En effet, les différents types de conditions aux limites utilisables en bas de versant ou à l'exutoire et mobilisables pour représenter la connexion avec le cours d'eau n'était pas très détaillés dans CMF. Nous avons en conséquence dû tester plusieurs représentations en vue d'aboutir à des systèmes comparables à Cathy et Hydrus1D/2D. Ainsi, la considération de conditions de flux et de charge, constantes ou variables dans le temps, a nécessité également de nombreux tests et échanges avec le développeur. Cependant, la majorité d'entre elles restent encore expérimentales et méritent d'être testées et validées. Nous avons amorcé ces tests pour les scénarios simulés, et avons ainsi contribué à alimenter le Wiki pour les prochains utilisateurs. Les conditions aux limites de charge sont maintenant correctes et robustes. Cependant, les conditions aux limites de flux nécessitent plus de tests et d'améliorations.

Ainsi, on peut conclure de ces tests sur de nombreux types de sols et scénarios, que CMF a un comportement proche de modèles plus complexes tels que Hydrus ou Cathy, si on raffine suffisamment le profil en vertical, en particulier à proximité de la surface. La résolution en surface peut quant à elle être relativement grossière (quelques mètres), alors que ce n'est pas le cas du modèle Hydrus par exemple, qui nécessite des mailles fines autant en profondeur et en surface. On obtient des simulations hydrologiques (flux en bas de versant, profils d'humidité, ...) similaires avec un coût de calcul nettement inférieur. Cependant, selon le type de sol, cette comparaison n'est pas toujours fiable, en particulier sur des sols plus sableux et perméables comme celui représentant la Morcille par exemple. Le développement d'un modèle à double perméabilité dans CMF a été basé sur des approches déjà développées dans d'autres modèles, tout en gardant notre approche simplifiée qui se base sur des réservoirs de stockage. Nous avons développé une nouvelle fonction d'infiltration dans les macropores de surface, qui s'active à la saturation de la couche de surface de la matrice. Deux fonctions d'échange ont été également développées pour représenter le transfert macropores-matrice, l'une reproduisant ce qui est fait dans le modèle Macro (*JarvisMacroMicroExchange*),

l'autre basée sur l'équation de Philip (*PhilipMacroMicroExchange*). Le nouveau modèle à double perméabilité a été appliqué en une et deux dimensions en comparant les résultats avec ceux d'Hydrus1D et Hydrus2D, respectivement. L'application sur un modèle à une dimension a été menée sur plusieurs scénarios, commençant par la comparaison avec l'exemple publié dans l'article de Simunek *et al.* (2003) qui représente un sol limoneux. Quatre sols-types (Sandy loam, Sandy clay loam, Clay loam, Silty loam) ont ensuite été modélisés en appliquant un flux constant à la surface ; enfin un sol sableux-limoneux a été soumis à une pluie en créneau. L'application de notre modèle à double perméabilité en deux dimensions a été menée sur un versant en ayant un sol homogène de pente 5%, dérivant de celui utilisé dans le chapitre 2. Le transfert des macropores vers la matrice suivant les deux fonctions d'échanges est comparable à celui simulé par Hydrus. On note toutefois que ce transfert est globalement plus important suivant la fonction *JarvisMacroMicroExchange* et que *PhilippMacroMicroExchange* fournit des résultats plus proches de ceux d'Hydrus. Le temps consacré à l'ensemble de ces tests, et la volonté d'aller jusqu'aux transferts de solutés m'a conduit à me limiter dans le cadre de ce travail à des sols homogènes. Notons par ailleurs que le modèle à double perméabilité, qu'il s'agisse de CMF ou d'Hydrus, rencontre des difficultés numériques, qui ont fortement bridé le choix des scénarios de comparaison. Ainsi, il n'a pas réellement été possible de confronter les débits générés en bas de versant par les deux modèles. Cela aurait pourtant été intéressant, les deux modèles adoptant des représentations différentes pour les flux dans les macropores, qui ne peuvent être que verticaux dans CMF, alors qu'ils peuvent advenir dans les deux dimensions pour Hydrus. Nous avons ainsi développé un modèle à une et deux dimensions en double perméabilité et qui simule les transferts de subsurface et de ruissellement, ce qui n'est ni le cas avec Hydrus2D ni avec autre modèle à double perméabilité à l'heure actuelle. Ce modèle est largement encore à évaluer mais nous avons abouti à une première étape de développement qui constitue une base pour de futurs tests.

La dernière étape a consisté à intégrer le transfert de solutés réactifs dans la plateforme. Là encore, la démarche a été progressive, en commençant d'abord avec un traceur dans un profil vertical de sol homogène, pour aborder ensuite le cas d'un soluté soumis à l'adsorption, d'un versant bi-dimensionnel, et d'un milieu à double perméabilité. La dégradation n'a pas été intégrée dans cette première approche. En outre, les solutés sont représentés dans un réservoir de stockage relié à chaque réservoir d'eau (couche de sol, pour les deux compartiments matrice et macropores s'il y a lieu). CMF ne représente actuellement que la convection, les phénomènes de dispersion cinématique et de diffusion moléculaire n'étant rendus que par de la diffusion numérique. Cette limitation a conduit à varier les paramètres correspondants dans Hydrus, pour estimer, pour chaque scénario, quel jeu de paramètres permettait de faire le mieux correspondre les résultats d'Hydrus et de CMF. Cette démarche n'est évidemment pas satisfaisante, et illustre qu'il reste nécessaire de poursuivre le développement de la représentation des solutés dans CMF. Pour mener au mieux ce développement, des tests supplémentaires sont auparavant à envisager, notamment en double perméabilité en variant le type de sol, les conditions initiales et aux limites, pour l'eau ainsi que pour les solutés. Par ailleurs, la comparaison inter-modèles a ses limites et il faudra confronter les simulations menées dans CMF à des données expérimentales, qui constituent le meilleur benchmark.

Conclusion sur l'outil de travail

Pour conclure sur le fait de s'approprier une plateforme hydrologique existante, j'ai pu exploiter le potentiel de ce type d'outil modulaire et open source. Celui-ci avait été choisi en partant de l'hypothèse qu'il était déjà stable et validé, et en espérant apporter des compétences pour représenter le transfert des pesticides et tester notamment différents scénarios d'aménagement d'éléments du paysage. Cependant, grâce à la comparaison de CMF avec Hydrus et Cathy, j'ai aussi découvert de nombreux dysfonctionnements/bugs dans le code existant, et ce dans des fonctions représentant les processus hydrologiques principaux : représentation de l'équilibre hydrostatique, anisotropie de la conductivité hydraulique, représentation de l'infiltration en surface, etc.... Ces améliorations successives ont impliqué de répéter les simulations avec plusieurs versions de CMF, ce qui a pris beaucoup de temps, et ne m'a pas permis d'aller aussi loin dans les tests et le développement que prévu initialement. Ce travail de thèse a nécessité de collaborer à distance, et nous a permis de constater qu'un modèle de ce genre, avec une approche modulaire, nécessite l'appui d'une équipe dédiée et pas seulement de dépendre de collaborations basées sur des projets, comme c'est le cas pour l'instant avec CMF. Lors des séjours à Giessen, j'ai effectivement vu à quel point cela est utile d'appartenir à l'équipe de développement quand on est au début des travaux, de la prise en main de l'existant au développement de nouveaux modules. La distance rend cette approche de modélisation collaborative plus compliquée et plus lente, car elle implique que le concepteur soit disponible lors des changements dans le code, pour générer de nouvelles versions, et chacun a ses contraintes temporelles par ailleurs.

Ceci explique que dans cette thèse, les tests ont d'abord dû être effectués sur des cas simples, afin d'être capable d'expliquer les résultats par étape. Ainsi, je n'ai pas eu le temps de réaliser la validation de façon suffisamment systématique, et de nombreuses étapes doivent encore être menées à bien, en particulier :

- des tests plus approfondis de la sensibilité des résultats au maillage et à la résolution temporelle. En particulier les chapitres consacrés respectivement aux écoulements préférentiels et aux transferts de solutés ont tous deux soulevé des problèmes de convergence selon les types de sols. Pour ce qui concerne les transferts de solutés, il s'est avéré nécessaire de modifier des paramètres de diffusion dans Hydrus pour donner des résultats comparables ; une autre représentation du transfert et en particulier des phénomènes de diffusion est donc à envisager
- représentation d'autres types de sols, hétérogènes notamment, à la fois sur le profil de sol et dans l'espace
- simulation d'autres événements pluvieux, au profil plus complexe (événements successifs, d'intensité variable ...)

De fait, au début de ce travail, dans la mesure où nous pensions que les fonctions de base de CMF étaient validés, les premiers tests effectués étaient assez complexes, et regroupaient d'ailleurs certains des éléments énumérés ci-dessus : le constat qu'il fallait revenir à des tests simples a pris un peu de temps, et a permis d'intégrer que toute démarche scientifique doit être progressive, et n'aborder un degré de complexité supplémentaire que quand le niveau actuel est bien maîtrisé et caractérisé. Une difficulté supplémentaire, qui

s'est manifestée notamment pour le développement du module d'infiltration dans les macropores, est liée à l'impossibilité d'accéder au pas de temps interne du modèle, et par voie de conséquence de décrire les choses de façon séquentielle. Cela nous semble un problème réel pour une telle plateforme, du moins dans l'usage que l'on voudrait en faire, de décrire les choses de façon simplifiée et « intuitive », en décrivant l'enchaînement des processus.

V.3. Perspectives scientifiques

Au-delà de ce constat, de nombreuses perspectives peuvent être envisagées pour améliorer les travaux commencés dans cette thèse. Ainsi, notre choix de commencer par des tests simples a conduit à négliger l'évapotranspiration dans un premier temps. Ce processus demandera évidemment à être intégré à terme pour représenter un paysage rural. Par ailleurs, qu'il s'agisse des écoulements à simple ou double perméabilité, il est essentiel de développer une nouvelle fonction représentant les échanges nappe-rivière, qui permettrait également de mieux rendre compte des discontinuités existantes dans les terrains agricoles, tels que les fossés. Une autre piste concerne les améliorations que l'on pourrait apporter au modèle à double perméabilité développé dans cette thèse, notamment pour l'application en deux dimensions :

Conceptualisation des macropores : l'approche choisie pour la représentation des macropores est simplifiée, la classe hérite de `WaterStorage` ce qui n'est pas le cas de la matrice qui hérite de la classe `SoilLayer`. Ceci pourra apporter plus de souplesse dans la définition des conditions aux limites ainsi qu'introduire plus d'instance de contrôle permettant une convergence rapide de la solution numérique. La connexion des macropores avec les conditions aux limites est encore expérimentale, et ce point mérite d'être approfondi. Par ailleurs, il serait intéressant de tester si une représentation plus conceptuelle du transport de solutés dans la double perméabilité, telle que l'utilisation de fonctions de transfert, ne permettrait pas un résultat aussi satisfaisant avec beaucoup moins de paramètres, dont l'acquisition sur le terrain est difficile.

Fonctions d'échanges : les deux fonctions d'échange développées dans le cadre de la thèse ont permis d'obtenir des résultats intéressants en termes de transfert des macropores vers la matrice. Par ailleurs, la fonction *PhilippMacroMicroExchange* permet également un transfert matrice \Rightarrow macropores. Les tests effectués dans cette thèse participent à la validation de ces fonctions, il faudra les renforcer, et notamment tester également les transferts matrice \Rightarrow macropores. Une difficulté pour ces tests est que les données expérimentales correspondantes sont très rares, sinon inexistantes, et que la validation s'effectue donc de façon croisée entre modèles. Ce constat plaide également en faveur d'une approche relativement simplifiée, qui permettrait d'aborder l'échelle du versant avec un nombre de paramètres réduit.

Modèle à double perméabilité en 2 dimensions : des problèmes numériques ont été rencontrés lors de l'application de notre nouveau modèle à double perméabilité en deux dimensions à l'échelle d'un versant. Il faudra déterminer si des améliorations du point de vue du calcul mathématique en parallèle au sein de la plateforme permettront d'améliorer la convergence, ou si le type de conceptualisation même doit être repensé.

Transfert des solutés : Les premiers tests de simulation de transfert de solutés dans CMF ont montré que la dispersion numérique ne suffit pas à rendre compte des phénomènes de dispersion cinématique et de diffusion moléculaire, tels que simulés par exemple par Hydrus. Ces processus doivent donc être explicitement inclus dans CMF. De même, on ne peut évidemment envisager un modèle de devenir de pesticides qui ne représente pas le processus de dégradation : celui-ci devra donc être inclus. De même, si des représentations plus complexes doivent être développées pour représenter les processus de dissipation et de transfert (adsorption/désorption ; dégradation, dispersion), il pourra devenir pertinent de développer des fonctions externes à CMF, couplées au modèle principal, plutôt que de continuer à les développer en interne au modèle, au risque de trop le complexifier.

V.4. Perspectives opérationnelles

Notre modèle à double perméabilité au sein de la plateforme de modélisation CMF peut être appliqué à des sols structurés en une ou deux dimensions en prenant en compte le transport de soluté suivant une convection. La plateforme permet également la prise en compte de l'adsorption suivant un isotherme de sorption linéaire. On peut également appliquer un coefficient de partage de l'eau qui s'infiltre en surface pour mieux se rapprocher à la réalité. Une application relativement directe des fonctionnalités développées dans la thèse serait de mettre en œuvre le modèle à double perméabilité pour représenter les transferts de pesticides au sein des bandes enherbées, dans la mesure où les écoulements préférentiels y sont souvent significatifs (Lacas, 2005). Les tests effectués sur le découpage spatial en surface ont montré qu'un découpage grossier (une parcelle = une maille) donnait des résultats raisonnables, à condition d'avoir un maillage vertical assez fin. Ainsi, en modifiant les connexions entre les éléments parcelles et bandes enherbées, on pourrait tester assez facilement des scénarios d'aménagement, et évaluer leur efficacité en terme d'impact sur les transferts.

On peut conclure que le modèle à double perméabilité développé dans le cadre de la thèse n'est qu'une première phase dans le développement de cette approche conceptuelle, mais qu'elle paraît pouvoir à terme permettre de représenter le transfert des pesticides à l'échelle du versant puis du bassin versant, même de façon assez simplifiée, et permettre ainsi des avancées pour la gestion de la contamination par les phytosanitaires.

Bibliographie

- Ababou, R., Trégarot, G., 2002. Coupled Modeling of Partially Saturated Flows : Macro-Porous Media, Interfaces, and Variability. Proc. CMWR 02, Comput Meth Water Resour, 23-28 June 2002, Delft, The Netherlands,, pp. 8.
- Abbott, M.B., Bathurst, J.C., Cunge, J.A., O'Connell, P.E., 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. *J.Hydrol.* 87,, p. 45-59.
- Ahuja, L.R., Hebson, C., , 1992. Root Zone Water Quality Model. In: GPSR Technical Report No. 2 (Ed.), USDA, ARS, Fort Collins, CO.
- Ahuja, L.R., Johnson, K.E., Heathman, G.C., 1995. Macropore transport of a surface-applied bromide tracer: Model evaluation and refinement. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 59,, p. 1234–1241.
- Ahuja, L.R., Rojas, K.W., Hanson, J.D., Shaffer, J.J., Ma, L., 2000. The Root Zone Water Quality Model. Water Resources Publications LLC, Highlands Ranch, CO.
- Ambroise, B., 1998. Streamflow generation within small rural catchments in a temperate environment: 1 - Processes and factors. *Revue des Sciences de l'Eau* 11, 471-495.
- Ambroise, B., 1999. Streamflow generation within small rural catchments in a temperate environment: 1 - Processes and factors. *Revue des Sciences de l'Eau/Journal of Water Science* 11, 471-495.
- Anderson, M.G., Burt, T.P., 1990. Process Studies in Hillslope Hydrology. Subsurface runoff. Chapter 11 in M. G.
- Argent, R., 2004. An overview of model intergration for envirenement applications - components, framework and semantics. *Environement Modelling and Software*, 19, p. 219-234.
- Arheimer, B., Lindström, G., Pers, C., Rosberg, J., Strömqvist, J., 2008. Development and test of a new Swedish water quality model for small-scale and large-scale applications. . XXV Nordic Hydrological Conference, Reykjavik, August 11-13, 2008. NHP Report No. 50,, pp. p. 483-492.
- Arnold, J.G., Williams, J.R., Srinivasan, R., King, K.W., Griggs, R.H., 1994. SWAT (Soil and Water Assessment Tool) User's Manual. USDA, Agricultural Research Service, Grassland, Soil and Water Research Laboratory, Temple, USA.
- Ashby, S.F., Falgout, R.D., 1996. A parallel multigrid preconditioned conjugate gradient algorithm for groundwater flow simulations. *Nuclear Science and Engineering* 124, 145-159.
- Barbash, J.E., Resek, E.A., 1996. Pesticides in groundwater: distribution, trends, and governing factors. Ann Arbor Press, Inc, Chelsea, Michigan.
- Barbash, J.E., Resek, E.A.,, 1996. Pesticides in groundwater : distribution, trends, and governing factors. Ann Arbor Press, Inc, Chelsea, Michigan.
- Barenblatt, G.I., Zheltov, I.P., Kochina, I.N., 1960. Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks. *J. Appl. Math. Mech.* 24, p. 1286–1303.
- Beazley, D.M., Fletcher, D., Dumont, D., 1996. SWIG : An Easy to Use Tool for Integrating Scripting Languages with C and C++. 4th Annual Tcl/Tk Workshop, Monterey, CA. July 6-10.

- Bende-Michl, U., Krause, P., Kralisch, S., Fink, M., Flügel, W.A., 2006. Current development and application of the modular Java based model JAMS to meet the targets of the EU-WFD in Germany. Proceedings of the iEMSs 3rd Biennial Meeting, " Summit on Environmental Modelling and Software".
- Beulke, S., Brown, C.D., Dubus, I.G., Harris, G., 2001. Evaluation of uncalibrated preferential flow models against data for isoproturon movement to drains through a heavy clay soil. *Pest Manag. Sci.* 57 (6), p. 537–547.
- Beven, K., 1985. Distributed models, in *Hydrological Forecasting*.
- Beven, K., 1989. Changing ideas in hydrology - The case of physically-based models *Journal of Hydrology* 105, 157-172.
- Beven, K., 1991a. Modeling preferential flow: an uncertain future? , In: Gish, T.J., Shirmohannadi, A. (Eds.), *Preferential Flow*, American Society of Agricultural Engineers, St Joseph, MI. , pp. pp 1–11.
- Beven, K., 1991b. Modeling preferential flow: an uncertain future?. In: Gish, T.J., Shirmohannadi, A. (Eds.), *Preferential Flow*, American Society of Agricultural Engineers, St Joseph, MI, p. 1–11.
- Beven, K., 2001. How far can we go in distributed hydrological modelling? *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 5, p. 1-12.
- Beven, K., Germann, P., 1982. Macropores and water flow in soils. *Water Resources Research* 18, pp 1311-1325.
- Beven, K., Germann, P., 2013. Macropores and water flow in soils revisited. *Water Resources Research* 49, 3071-3092.
- Beven, K., Wood, E.F., 1993. Flow routing and the hydrological response of channel networks., *Channel network hydrology*, Center for Research on Environmental Systems, Institute of Environmental and Biological Sciences., pp. p. 99-128.
- Beven, K.J., 1995. Chapter 18: TOPMODEL. . Littleton, Colo.
- Beven, K.J., 2006. The holy grail of scientific hydrology: $Q_t = H(S, R, \Delta t)A$ as closure. *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 10, p. 609–618.
- Beven, K.J., Calver, A., Morris, E., 1987. The Institute of Hydrology distributed model. Institute of Hydrology Rep. No. 98, Wallingford, U.K.
- Bixio, A.C., Putti, M., Orlandini, S., Paniconi, C., 2000. Physically-based distributed model for coupled surface runoff and subsurface flow simulation at the catchment scale. *Computational methods in water resources - Volume 2 - Computational methods, surface water systems and hydrology*, 1115-1122.
- Boesten, J.J.T.I., 2004. Influence of dispersion length on leaching calculated with PEARL, PELMO and PRZM for FOCUS groundwater scenarios. *Pest Management Science* 60, 971-980.
- Bouma, J., 1981. Comment on micro, meso and macroporosity of soil. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 45, p. 1244-1245.
- Bouvet, L., Louchart, X., Barès, M., Lalauze, S., Voltz, M., 2010. Modélisation intégrée des agro-hydrosystèmes avec MHYDAS : exemple des transferts de pesticides en milieu viticole méditerranéen., 40ème congrès scientifique du Groupe Français des Pesticides, Banyuls sur Mer.
- Bradford, S.A., Šimůnek, J., Bettehar, M., van Genuchten, M.T., Yates, S.R., 2003. Modeling colloid attachment, straining, and exclusion in saturated porous media. *Environ. Sci. Technol.* 37 (10), p. 2242–2250.
- Branger, F., 2007. Utilisation d'une plate-forme de modélisation environnementale pour représenter le rôle d'aménagements hydro-agricoles sur les flux d'eau et de pesticides : Application au bassin

- versant de la Fontaine du Theil., Unité de Recherche Qualité des Eaux et Prévention des Pollutions du Cemagref de Lyon. Université Joseph Fourier, p. 238.
- Branger, F., Braud, I., Debionne, S., Viallet, P., Dehotin, J., Hénine, H., Nedelec, Y., Anquetin, S., 2010. Towards multi-scale integrated hydrological models using the LIQUID® framework. Overview of the concepts and first application examples. *Environmental Modelling & Software* 25, 1672-1681.
- Branger, F., Braud, I., Debionne, S., Viallet, P., Vauclin, M., Carluier, N., Tournebize, J., Dehotin, J., Haverkamp, R., Kao, C., Pellarin, T., Saâdi, Z., Varado, N., 2005. Utilisation d'une plate-forme de modélisation intégrée pour la construction d'un modèle hydrologique de bassin versant. Journées modélisation au Cemagref, Clermont-Ferrand, 3-4 Octobre 2005, p. 1.
- Branger, F., Braud, I., Viallet, P., Debionne, S., 2008. Modelling the influence of landscape management practices on the hydrology of a small agricultural catchment. *Proceedings of the 8th International Conference on HydroSciences and Engineering, Nagoya, JPN*, pp. 586-594.
- Branger, F., De Sesmaisons, D., Tournebize, J., Carluier, N., Kao, C., Vauclin, M., 2006a. Conceptual modelling of solute transport in a subsurface drained field using equivalent soil compartments. *European Geophysical Union General Assembly, Vienna, AUT*, 2-7 April 2006, p. 1.
- Branger, F., Debionne, S., Viallet, P., Braud, I., Vauclin, M., 2006b. Using the liquid framework to build an agricultural subsurface tile-drainage model. *7th International Conference on Hydroinformatics, Nice*, 4-7 September 2006, p. 8.
- Branger, F., Kermadi, S., Jacqueminet, C., Michel, K., Labbas, M., Krause, P., Kralisch, S., Braud, I., 2013. Assessment of the influence of land use data on the water balance components of a peri-urban catchment using a distributed modelling approach. *Journal of Hydrology* 505, 312-325.
- Branger, F., Tournebize, J., Carluier, N., Kao, C., Braud, I., Vauclin, M., 2009. A simplified modelling approach for pesticide transport in a tile-drained field: the PESTDRAIN model. *Agricultural Water Management* 96, 415-428.
- Branger, F., Viallet, P., Debionne, S., Braud, I., Carluier, N., Vauclin, M., 2007. Utilisation de la plate-forme LIQUID pour modéliser l'influence d'aménagements hydro-agricoles sur l'hydrologie d'un petit bassin versant. Journées modélisation au Cemagref, Clermont-Ferrand, 26-27 Novembre 2007, p. 1.
- Braud, I., Branger, F., Debionne, S., Viallet, P., Dehotin, J., Hénine, H., Nedelec, Y., Anquetin, S., 2010. Vers une modélisation hydrologique intégrée s'appuyant sur la plate-forme LIQUID. Concepts et premiers exemples d'applications. Séminaire « Modélisation des hydrosystèmes », 22/04/2010 - 23/04/2010, Paris, FRA, p. 36.
- Brooks, R., Corey, A., 1964. Hydraulic properties of porous media. *Hydrology Paper No. 3*, Colorado State University, Civil Engineering Dep., Fort Collins, CO.
- Brown, C., Balderacchi, M., van Beinum, w., Capri, E., Trevisan, M., 2012. Definition of vegetative filter strip scenarios for Europe. Environment Department, University of York, Heslington, York, YO10 5DD, UK, p. pp. 71.
- Brusseau, M.L., 1995. Cooperative Sorption of Organic Chemicals in Systems Composed of low Organic Carbon Aquifer Materials. *Environ. Sci. Technol.* 25 (10), p. 1747-1752.
- Buis, S., Piacentini, A., Déclat, D., 2006. PALM : a computational framework for assembling high-performance applications. *Concurrency : practice and experience.* 18, p. 231-245.
- Buytaert, W., Reusser, D., Krause, S., Renaud, J.P., 2008. Why can't we do better than Topmodel? *Hydrol.Proc.* 22, p. 4175-4179.

- Calvet, R., 1989. Adsorption of Organic Chemicals in Soils. *Environmental Health Perspectives*, 83, p. 145-177.
- calvet, R., 2003. Le sol propriétés et fonctions - Tome 1: Constitution, Structures et phénomènes aux interfaces
- Calvet, R., 2005. Les pesticides dans le sol: conséquences agronomiques et environnementales.
- Camporese, M., Paniconi, C., Putti, M., Orlandini, S., 2010. Surface-subsurface flow modeling with path-based runoff routing, boundary condition-based coupling, and assimilation of multisource observation data. *Water Resources Research* 46.
- Carluer, N., 1998. Vers une modélisation hydrologique adaptée à l'évaluation des pollutions diffuses : prise en compte du réseau anthropique. Adaptation au bassin versant de Naizin (Morbihan). p. 400.
- Carluer, N., 2013. Contribution à la modélisation du transfert de produits phytosanitaires en bassin versant rural. Prise en compte de l'influence des éléments du paysage. p. 116.
- Carluer, N., De Marsily, G., 2004. Estimation et modélisation de l'influence des réseaux anthropiques sur l'hydrologie d'un petit bassin versant : conséquences pour les composantes rapides de l'écoulement, la qualité de l'eau et l'aménagement du territoire. *Journal of Hydrology*, 76-95.
- Chappell, N.A., 2010. Soil pipe distribution and hydrological forecasting within the humid tropics: A synthesis. *Hydrol. Process.*, 24, p. 1567–1581.
- Christiansen, J.S., Thorsen, M., Clausen, T., Hansen, S., Refsgaard, J.C., 2004. Modelling of macropore flow and transport processes at catchment scale. *Journal of Hydrology* 299, 136-158.
- Clark, M.P., Kavetski, D., Fenicia, F., 2011. Pursuing the method of multiple working hypotheses for hydrological modeling. *Water Resources*, Vol. 47, p. 1-16.
- Clarke, R.T., 1973. A review of some mathematical models used in hydrology, with observations on their calibration and use. *Journal of Hydrology* N°19, p. 1-20.
- Cohen, S.D., Hindmarsh, A.C., 1996. CVODE, A Stiff/Nonstiff ODE Solver in C. *Computers in Physics* 10(2), pp. 138-143.
- CORPEN, 2007. Les fonctions environnementales des zones tampons. Les bases scientifiques et techniques des fonctions de production des eaux. Groupe Zones tampons, p. 75.
- Crawford, N.H., Linsley, K., 1996. Digital Simulation in Hydrology : Stanford Watershed Model. In: Rapport technique N° 39, D.C.E., Univ. Stanford (CA, USA) (Ed.), p. pp. 210.
- Dawdy, D.R., O'Donnell, T., 1965. Mathematical models of catchment behavior. *J.Hydraul. Div. Am. Soc. Civ. Eng.*, 91, p. 113-137.
- De Marsily, G., 1994. Quelques réflexions sur l'utilisation des modèles en hydrologie. *Revue des sciences de l'eau / Journal of Water Science*, vol. 7, n° 3, p. 219-234.
- De Marsily, M., 1981. Hydrogéologie quantitative. Masson, Paris.
- Dehotin, J., 2007. Prise en compte de l'hétérogénéité des surfaces continentales dans la modélisation hydrologique distribuée. Exemple d'application avec des données du haut-bassin de la Saône. p. 328.
- Delfs, J.O., Blumensaat, F., Wang, W., Krebs, P., Kolditz, O., 2012. Coupling hydrogeological with surface runoff model in a Poltva case study in Western Ukraine. *Environmental Earth Sciences* 65, 1439-1457.
- Delfs, J.O., Wang, W.Q., Kalbacher, T., Singh, A.K., Kolditz, O., 2013. A coupled surface/subsurface flow model accounting for air entrapment and air pressure counterflow. *Environmental Earth Sciences* 69, 395-414.

- Delle Sitea, A., 2001. Factors Affecting Sorption of Organic Compounds in Natural Sorbent / Water Systems and Sorption Coefficients for Selected Pollutants. A Review. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, Vol. 30.
- Derhold, D., Nordmeyer, H., 1995. Leaching of herbicides in soil macropores as a possible reason for groundwater contamination. In: *BCPC Monograph n° 62: Pesticide Movement to Water*, Warwick UK, 3-5 april 1995, p. 217-222.
- Duguid, J.O., Lee, P.C.Y., 1977. Flow in fractured porous media. *Water Resour. Res.* 13, p. 558–566.
- Edijatno, Michel, C., 1989. Un modèle pluie-débit journalier à trois paramètres. *La Houille Blanche*(2), p. 113-121.
- Fabre, J.C., Louchart, X., Moussa, R., Dagès, C., Colin, F., Rabotin, M., Raclot, D., Lagacherie, P., Voltz, M., 2010. OpenFLUID: a software environment for modelling fluxes in landscapes. *LandMod 2010 : International Conference on Integrative Landscape Modelling Montpellier*, Montpellier.
- Federer, C.A., 1995. BROOK90 - A simulation model for evapotranspiration, soil water and streamflow, Version 3.24. Computer freeware and documentation,. USDA, Forest Service, Durham, USA.
- Ferrari, F., Klein, M., Capri, E., Trevisan, M., 2005. Prediction of pesticide volatilization with PELMO 3.31. *Chemosphere* 60, 705-713.
- Fink, M., Krause, P., Kralisch, S., Bende-Michl, U., Flügel, W.A., 2007. Development and application of the modelling system J2000-S for the EU-water framework directive. *Advances in Geosciences* 11, 123-130.
- Flury, M., 1996. Experimental evidence of transport of pesticides through field soils. A review, *J. Environ. Qual.*, 25, p. 25–45.
- FOCUS, 2001. FOCUS Surface Water Scenarios in the EU Evaluation Process under 91/414/EE. Report of the FOCUS Working Group on Surface Water Scenarios, EC Document Reference SANCO/4802/2001, p. 221.
- FOCUS, 2002. FOCUS groundwater scenarios in the EU review of active substances. Report of the FOCUS Groundwater Scenarios Workgroup, EC Document Reference SANCO/321/2000, p. 202.
- Foucault, A., Raoult, J.F., 2001. *Dictionnaire de Géologie*.
- Fread, D.L., 1993. Flow routing in *Handbook of Hydrology*., McGraw-Hill, New York.
- Freeze, R.A., 1972. Role of subsurface flow in generating surface runoff: 1. Base flow contributions to channel flow. *Water Resour. Res.*, 8, p. 609–623.
- Freeze, R.A., Harlan, R.L., 1969. Blueprint for a physically-based, digitally-simulated hydrologic response model. *J.Hydrol.* 9, p. 237-258.
- Freundlich, H., 1909. *Kapillarchemie*., Leipzig, p. p. 591.
- Gärdenäs, A.I., Šimůnek, J., Jarvis, N.J., van Genuchten, M.T., 2006. Twodimensional modelling of preferential water flow and pesticide transport from a tile-drained field. *J. Hydrol.* 329 (3–4), p. 647–660.
- Gaudet, J.P., Jégat, H., Vachaud, G., Wierenga, P.J., 1977. Solute transfer, with exchange between mobile and stagnant water, through unsaturated sand. . *Soil Sci. Soc. Am. J.* 41, p. 665–671.
- Gerke, H.H., 2006. Preferential flow descriptions for structured soils. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science-Zeitschrift Fur Pflanzenernahrung Und Bodenkunde* 169, 382-400.

- Gerke, H.H., Köhne, J.M., 2004. Dual-permeability modelling of preferential bromide leaching from a tile drained glacial till agricultural field. *J. Hydrol.* 289, p. 239–257.
- Gerke, H.H., van Genuchten, M.T., 1993a. A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous-media. *Water Resources Research*, pp. 305-319.
- Gerke, H.H., van Genuchten, M.T., 1993b. Evaluation of the 1st order water transfer term for variably saturated dual-porosity flow models., *Water Resources Research*, pp. 1225-1238.
- Gerke, H.H., van Genuchten, M.T., 1996. Macroscopic representation of structural geometry for simulating water and solute movement in dual-porosity media., *Advances in Water Resources*, pp. p. 343-357.
- Germann, P.F., 2010. Comment on "Theory for source-responsive and free-surface film modeling of unsaturated flow". *Vadose Zone J.*, 9, p. 1100–1101.
- Germann, P.F., Beven, K.J., 1981. Water flow in soil macropores, I. An experimental approach. *J. Soil Sci.*, 32, p. 1–13.
- Germann, P.F., Pierce, R.S., Beven, K., 1986. Kinematic wave approximation to the initiation of subsurface storm flow in a sloping forest soil. *Adv. Water Resour.*, 9, p. 70–76.
- Gish, T.J., Shirmohammadi, A., 1991. Preferential flow., *Proceedings of the National Symposium*, 16–17 Dec. 1991, Chicago, IL, Am. Soc. Agric. Eng., St Joseph, Michigan, p. 408.
- Goltz, M.N., Roberts, P.V., 1986. Interpreting organic solute transport data from a field experiment using physical nonequilibrium models. *J. Contam. Hydrol.* 1., p. 77–93.
- Grebil, G., Novak, S., Perrin Ganier, C., Schiavon, M., 2001. La dissipation des produits phytosanitaires appliqués au sol,[en ligne], *Revue EAT thématique*. p. 31-44.
- Green, W.H., Ampt, G.A., 1911. Studies on soil physics. I. The flow of water and air through soils. *J. Agric. Sci.* 4, p. 1–24.
- Guay, C., Nastev, M., Paniconi, C., Sulis, M., 2012. Comparison of two modeling approaches for groundwater–surface water interactions. *Hydrol. Process*.
- Hamdi, M., Durnford, D., Loftis, J., 1994. Bromide transport under sprinkler and ponded irrigation. *J. Irrig. Drain. Eng.* 120, p. 1086–1097.
- Hatchings, C., Struve, J., Westen, S., Millard, K., Fortune, D., 2002. HarmonIT work package 1 : State of the review., *Report technique*, HR Wallingford.
- Hayo, M.G., 1997. évaluer l'impact des pesticides sur l'environnement. INRA, station d'Agronomie., pp. 18.
- Henderson, F.M., 1966. *Open Channel Flow*. Macmillan, New York.
- Hendrickx, J.M.H., Dekker, L.W., Boersma, O.H., 1993. Unstable wetting fronts in water repellent field soils. *J. Environ. Qual.* 22., p. 109–118.
- Hendrickx, J.M.H., Flury, M., 2001. Uniform and Preferential Flow Mechanisms in the Vadose Zone. *Conceptual Models of Flow and Transport in the Fractured Vadose Zone*. National Research Council, National Academy of Sciences, Washington, DC., pp. p. 149 - 187.
- Hewlett, J.D., 1961. Some ideas about storm runoff and base flow. *Southeast Forest Experiment Station Annual Rep.*, USDA Forest Service, Athens, Ga., p. 62–66.
- Horton, R.E., 1933. The role of infiltration in the hydrologic cycle. *Trans., Am. Geophys. Union*, 145, p. 446–460.

- Huyakorn, P.S., Thomas, S.D., Thompson, B.M., 1984. Techniques for making finite elements competitive in modeling flow in variably saturated porous media. *Water Resources Research*, 20(8), p. 1099–1115.
- Imbeau, M.E., 1892. La Durance: Regime, crues et inundations. *Ann. Ponts Chaussees, Mem. Doc., Ser.*, 3(I), p. 5–18.
- Ivanov, V.Y., Vivoni, E.R., Bras, R.L., Entekhabi, D., 2004. Catchment hydrologic response with a fully distributed triangulated irregular network model. *Water Resources Research* 40, W1110201–W1110223.
- Jankowsky, S., 2011. Understanding and modelling of hydrological processes in small peri-urban catchments using an object-oriented and modular distributed approach Application to the Chaudanne and Mercier sub-catchments (Yzeron catchment, France). p. 331.
- Jarvis, N.J., 1994a. The MACRO model (Version 3.1) - Technical description and sample simulations. Reports and Dissertations. In: 19, D.S.S., Swedish Univ. Agric. Sciences, Uppsala, Sweden (Ed.), p. 51.
- Jarvis, N.J., 1994b. The MACRO Model (Version 3.1). Technical Description and Sample Simulations. Reports and Dissertations
19. In: Department of Soil Science, S.U.o.A.S. (Ed.), Uppsala, Sweden, p. 51.
- Jarvis, N.J., 1998. Modeling the impact of preferential flow on nonpoint source pollution. In: In: Selim, H.M., Ma, L. (Eds.). (Ed.), *Physical Nonequilibrium in Soils: Modeling and Application.*, Ann Arbor Press, Chelsea, MI, pp. 195–221.
- Jarvis, N.J., 2007. A review of non-equilibrium water flow and solute transport in soil macropores: principles, controlling factors and consequences for water quality. *European Journal of Soil Science* 58, 523-546.
- Jarvis, N.J., Hollis, J.M., Nicholls, P.H., Mayr, T., Evans, S.P., 1997. MACRO-DB: a decision-support tool for assessing pesticide fate and mobility in soils. *Environmental Modelling & Software* 12, 251-265.
- Jones, J.A.A., 2010. Soil piping and catchment response. *Hydrol. Process*, 24, p. 1548–1566.
- Jones, J.P., Sudicky, E.A., Brookfield, A.E., Park, Y.J., 2006. An assessment of the tracer-based approach to quantifying groundwater contributions to streamflow. *Water Resources Research* 42.
- Jones, J.P., Sudicky, E.A., McLaren, R.G., 2008. Application of a fully-integrated surface-subsurface flow model at the watershed-scale: A case study. *Water Resources Research*, VOL. 44,, p. 1-13.
- Jury, W.A., Focht, D.D., Farmer, W.J., 1987. Evaluation of pesticide groundwater pollution potential from standard indices of soil-chemical adsorption et biodegradation *J. Environ. Qual.* 16,, p. 422-428.
- Kampf, S.K., Burges, S.J., 2007. A framework for classifying and comparing distributed hillslope and catchment hydrologic models. *Water Resources Research* 43.
- Kavvas, M.L., Chen, Z.Q., Dogrul, C., Yoon, J.Y., Ohara, N., Liang, L., Aksoy, H., Anderson, M.L., Yoshitani, J., Fukami, K., Matsuura, T., 2004. Watershed Environmental Hydrology (WEHY) Model, based on upscaled conservation equations: hydrologic module. *Journal of Hydrologic Engineering*, 9(6), p. 450-464.
- Kladivko, E.J., Brown, L.C., Baker, J.L., 2001. Pesticide transport to subsurface tile drains in humid regions of North America. *Crit. Rev. Environ. Sci. Technol.*, 31, p. 1–62.

- Klein, M., Muller, M., Dust, M., Gorlitz, G., Gottesburen, B., Hassink, J., Kloskowski, R., Kubiak, R., Ressler, H., Schafer, H., Stein, B., Vereecken, H., 1997. Validation of the pesticide leaching model PELMO using lysimeter studies performed for registration. *Chemosphere* 35, 2563-2587.
- Köhne, J.M., Köhne, S., Gerke, H.H., 2002. Estimating the hydraulic functions of dual-permeability models from bulk soil data. *WATER RESOURCES RESEARCH*, VOL. 38, NO. 7, p. 1-11.
- Köhne, J.M., Köhne, S., Simunek, J., 2009a. A review of model applications for structured soils: a) Water flow and tracer transport. *Journal of Contaminant Hydrology* 104, 4-35.
- Köhne, J.M., Köhne, S., Simunek, J., 2009b. A review of model applications for structured soils: b) Pesticide transport. *Journal of Contaminant Hydrology* 104, 36-60.
- Kollet, S.J., Maxwell, R.M., 2006. Integrated surface-groundwater flow modeling: A free-surface overland flow boundary condition in a parallel groundwater flow model. *Advances in Water Resources* 29, 945-958.
- Kördel, W., Egli, H., Klein, M., 2008. Transport of pesticides via macropores (IUPAC Technical Report). *Pure and Applied Chemistry*, 80(1).
- Kostiakov, A.M., 1932. On the dynamics of the coefficient of water percolation in soils and of the necessity of studying it from a dynamic point of view for purposes of amelioration., *rans. 6th Communic. Int. Soil Science Society, Part 1, Russia*, pp. p. 17–29.
- Kraft, P., 2012. A hydrological programming language extension for integrated catchment models. *Justus-Liebig-Universität, Gießen*, p. P. 116.
- Kraft, P., Multsch, S., Vaché, K.B., Frede, H.G., Breuer, L., 2010. Using Python as a coupling platform for integrated catchment models. *Advances in Geosciences* 27, 51-56.
- Kraft, P., Vache, K.B., Breuer, L., Frede, H.G., 2008. A solute and water flux library for catchment models. *International Congress on Environmental Modelling and Software Integrating Sciences and Information Technology for Environmental Assessment and Decision Making 4th Biennial Meeting of iEMSs*, p. 2053-2055.
- Kraft, P., Vaché, K.B., Frede, H.G., Breuer, L., 2011. CMF: A Hydrological Programming Language Extension For Integrated Catchment Models. *Environmental Modelling and Software* 26, 828-830.
- Kralisch, S., 2012. Integrated modelling with the jena adaptable modelling system (JAMS). . In *Modelling Workshop, Cemagref, Lyon*.
- Kralisch, S., Krause, P., 2006. JAMS - A framework for natural resource model development and application. *Proceedings of the iEMSs 3rd Biennial Meeting, " Summit on Environmental Modelling and Software"*.
- Kralisch, S., Zander, F., Krause, P., 2009. Coupling the RBIS Environmental Information System and the JAMS Modelling Framework. *Univ Western Australia, Nedlands*.
- Krause, P., 2002. Quantifying the impact of land use changes on the water balance of large catchments using the J2000 model. *Physics and Chemistry of the Earth*, 27, p. 663-673.
- Krause, P., Bende-Michl, U., Fink, M., Helmschrot, J., Kralisch, S., Kunne, A., 2009. Parameter sensitivity analysis of the JAMS/J2000-S model to improve water and nutrient transport process simulation - a case study for the Duck catchment in Tasmania. *18th World Imacs Congress and Modsim09 International Congress on Modelling and Simulation: Interfacing Modelling and Simulation with Mathematical and Computational Sciences*, 3179-3186.
- Kumar, M., Duffy, C.J., Salvage, K.M., 2009. A Second-Order Accurate, Finite Volume-Based, Integrated Hydrologic Modeling (FIHM) Framework for Simulation of Surface and Subsurface Flow. *Vadose Zone Journal* 8, 873-890.

- Kutilek, M., Nielsen, D.R., 1994. *Soil Hydrology*. Catena Verlag, Cremlingen.
- Labbas, M., 2015. Modélisation hydrologique de bassins versants périurbains et influence de l'occupation du sol et de la gestion des eaux pluviales Application au bassin de l'Yzeron (130 km²). Ecole Doctorale Terre, Univers, Environnement. Université de Grenoble, p. 379.
- Lacas, J.G., 2005. Processus de dissipation des produits phytosanitaires dans les zones tampons enherbées. Etude expérimentale et modélisation en vue de limiter la contamination des eaux de surface. p. 307.
- Lacas, J.G., Voltz, M., Gouy, V., Carluer, N., Gril, J.J., 2005. Using grassed strips to limite pesticide transfer to surface water: a review. *Agronomy for Sustainable Development* 25, 253-266.
- Lagacherie, P., Rabotin, M., Colin, F., Moussa, R., Voltz, M., 2010. Geo-MHYDAS: A landscape discretization tool for distributed hydrological modeling of cultivated areas. *Computers & Geosciences* 36, 1021-1032.
- Larsbo, M., Jarvis, N.J., 2003. MACRO5.0. A model of water flow and solute transport in macroporous soil. Technical Description. . Swedish Univ. of Agricult. Sci., Dept. of Soil Sci., Uppsala, Sweden., p. 48.
- Larsbo, M., Jarvis, N.J., 2005. Simulating solute transport in a structured field soil: uncertainty in parameter identification and predictions. . *J. Environ. Quality* 34., p. 621–634.
- Leonard, R.A., 1990. Movement of pesticides into surface waters.
- Lighthill, M.J., Whitham, G.B., 1955. On kinematic waves: 1. Flood movement in long rivers. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 229, p. 281–316.
- Lindström, G., Pers, C.P., Rosberg, R., Strömqvist, J., Arheimer, B., 2010. Development and test of the HYPE (Hydrological Predictions for the Environment) model – A water quality model for different spatial scales. . *Hydrology Research*, 41, p. 295-319.
- Linsley, R.K., 1982. Rainfall-runoff models-an overview. *Water Resources Publications*, p. 3–22.
- Louchart, X., Voltz, M., Andrieu, H., 2000. Dynamique de la mobilisation et du transfert du diuron par ruissellement. *C. R. Acad. Sci. Paris, Sciences de la Terre et des planètes / Earth and Planetary Sciences* 331, p. 475–481.
- Luwmoore, R.J., 1981. Micro, meso, macroporosity of soil. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 45, p. 6771.
- Ma, L., Ahuja, L.R., Malone, R.W., 2007. Systems modelling for soil and water research and management: current status and needs for the 21st century. *Trans. ASABE* 50 (5), p. 1705–1713.
- Malone, R.W., Ahuja, L.R., Ma, L.W., Wauchope, R.D., Ma, Q.L., Rojas, K.W., 2004. Application of the Root Zone Water Quality Model (RZWQM) to pesticide fate and transport: an overview. . *Pest Manag. Sci.* 60 (3), p. 205–221.
- Malone, R.W., Shipitalo, M.J., Ma, L., Ahuja, L.R., Rojas, K.W., 2001. Macropore component assessment of the Root Zone Water Quality Model (RZWQM) using no-till soil blocks. *Trans. ASAE* 44, p. 843–852.
- Maloszewski, P., Zuber, A., 1985. On the theory of tracer experiments in fissured rocks with a porous matrix. . *J. Hydrol.* 79, p. 333–358.
- Marshall, T.J., Holmes, J.W., 1979. *Soil Physics*. Cambridge University Press, 345.
- Maxwell, R.M., Putti, M., Meyerhoff, S., Delfs, J.O., Ferguson, I.M., Ivanov, V., Kim, J., Kolditz, O., Kollet, S.J., Kumar, M., Lopez, S., Niu, J., Paniconi, C., Park, Y.J., Phanikumar, M.S., Shen, C., Sudicky, E.A., Sulis, M., 2014. Surface-subsurface model intercomparison: A first set of benchmark results to diagnose integrated hydrology and feedbacks. *Water Resources Research* 50, 1531-1549.

- Molénat, J., 2008. Hydrologie et transport de substances dissoutes dans les aquifères superficiels., UMR INRA-Agrocampus, Sol- Agro et Hydrosystème et Spatialisation de Rennes. Université de Rennes 1, p. 86.
- Montgomery, D.R., Foufoula-Georgiou, E., 1993. Channel network source representation using digital elevation models. *Water Resour Res* ;29(12), p. 3925–3934.
- Morin, G., Fortin, J.P., Lardeau, J.P., Paquette, S., 1981. Modèle CEQUEAU : Manuel d'utilisation. In: INRS-Eau, S.-F., Canada (Ed.).
- Moussa, R., Bocquillon, C., 1996. Criteria for the choice of flood-routing methods in natural channels. *Journal of Hydrology* 186, p. 1-30.
- Moussa, R., Voltz, M., Andrieux, P., 2002. Effects of the spatial organization of agricultural management on the hydrological behaviour of a farmed catchment during flood events. *Hydrological Processes* 16, 393-412.
- Moussa, R., Voltz, M., Lagacherie, P., Louchart, X., Colin, F., Fabre, J.C., 2006. MHYDAS : Modélisation Hydrologique Spatialisée des AgroSystèmes - Spatially Distributed Hydrological Modelling of AgroSystems. . EGU , Vienne (Autriche).
- Multsch S., K., P., Frede, H.-G., Breuer, L. , 2011. Development and application of the generic Plant growth Modeling Framework (PMF) Modelling and Simulation. Modelling and Simulation Society of Australia and New Zealand, pp. 995-1001.
- Mulvany, T.J., 1950. On the use of self-registering rain and flood gauges. *Proc. Inst. Civ. Eng.*, 4(2), p. 1-8.
- Musy, A., 1998. Hydrologie appliqué
- Musy, A., Soutter, M., 1991. Physique du sol.
- Narasimhan, T.N., 1998. Hydraulic characterization of aquifers, reservoir rocks, and soils: A history of ideas. *Water Resour. Res.*, 34,, p. 33–46.
- Nielsen, D.R., Wendroth, O., 2003. Spatial and temporal statistics – sampling field soil and their vegetation. Catena Verlag, Reiskirchen, Germany, p. 398.
- Nkedi-Kizza, P., Rao, P.S.C., Jessup, R.E., Davidson, J.M., 1982. Ion-exchange and diffusive mass transfer during miscible displacement through an aggregated Oxisol. . *Soil Sci. Soc. Am. J.* 46, p. 471–476.
- Orlandini, S., Rosso, R., 1998. Parameterization of stream channel geometry in the distributed modeling of catchment dynamics. *Water Resources Research* 34, 1971-1985.
- Ousterhout, J., 1998. Scripting : Higher Level Programming for the 21st Century. *EEE Computer magazine*, p. 10-09.
- Panday, S., Huyakorn, P.S., 2004. A fully coupled physically-based spatially-distributed model for evaluating surface/subsurface flow. *Advances in Water Resources*, 27 p. 361–382.
- Paniconi, C., Putti, M.A., 1994. Comparison of Picard and Newton iteration in the numerical solution of multidimensional variably saturated flow problems. *Water Resour Res* 1994;30(12), p. 3357–3374.
- Partington, D., Werner, A.D., Brunner, P., Simmons, C.T., Dandy, G.C., Maier, H.R., 2009. Using a fully coupled surface water - groundwater model to quantify streamflow components. 18th World IMACS / MODSIM Congress, Cairns, Australia 13-17 July 2009, p. 3102-3108.
- Peyrard, X., Liger, L., Gouy, V., 2014. Évaluation des transferts latéraux de pesticides dans le sol, à faible profondeur. 44e congrès du Groupe Français des Pesticides, 26/05/2014 - 29/05/2014, Schoelcher, FRA, p. 1.

- Philip, J., 1957. The theory of infiltration. 1. The infiltration equation and its solution. *Soil Science* (83), p. 345–357.
- Philip, J.R., 1968. The theory of absorption in aggregated media. *Aust. J. Soil Res* 6, p. 1–19.
- Post, D.A., Jakeman, A.J., Littlewood, I.G., Whitehead, P.G., Jayasuriya, M.D.A., 1996. Modelling land cover induced variations in hydrologic response : Picaninny Creek, Victoria. *Ecological Modelling* 86, p. 177-182.
- Qu, Y., Duffy, C.J., 2007. A semidiscrete finite volume formulation for multiprocess watershed simulation. *Water Resources Research* 43.
- Rahman, J., Seaton, S., Cuddy, S., 2004. Making frameworks more useable : using model introspection and metadata to develop model processing tools. *Environmental Modelling and Software*, 19, p. 275-284.
- Rahman, J., Seaton, S., Perraud, J., Hotham, H., Verreli, D., Coleman, J., 2003. It's TIME for a new environmental modelling framework International Congress on Modelling and Simulation., Townsville, Australia, pp. p. 1727-1732.
- Refsgaard, J.C., 1997. Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models. *Journal of Hydrology* 198, 69-97.
- Reichenberger, S., Amelung, W., Laabs, V., Pinto, A., Totsche, K.U., Zech, W., 2002a. Pesticide displacement along preferential flow pathways in a Brazilian Oxisol. *Geoderma*, 110, p. 63–68.
- Reichenberger, S., Amelung, W., Laabs, V., Pinto, A., Totsche, K.U., Zech, W., 2002b. Pesticide displacement along preferential flow pathways in a Brazilian Oxisol. *Geoderma*, 110, p. 63–68.
- Ross, P.J., Smettem, K.R.J., 2000. A simple treatment of physical nonequilibrium water flow in soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 64, p. 1926–1930.
- Sabatini, D.A., Austin, T.A., 1990. Sorption and Transport of Pesticide in Ground Water : Critical Review. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, Vol. 116, p. 3-15.
- Saint-Venant, B., 1871. Théorie du mouvement non permanent des eaux, avec application aux crues des rivières et à l'introduction des marées dans leurs lits. *C.R. S6an. Acad. Sci*, 73, p. 237-240.
- Samouelian, A., Dagès, C., Storck, V., Negro, S., Huttel, O., Voltz, M., 2014. Etude expérimentale de la dynamique de percolation du Diuron dans les fonds de fossés agricoles suite à des successions de crues., 44^{ème} congrès du Groupe Français des pesticides, Schoelcher, Martinique, France.
- Schulze, R., 1989. ACRU: Background, Concepts and Theory., Report 35, Agricultural Catchments Research Unit, Department of Agricultural Engineering, University of Natal, Pietermaritzburg, South Africa.
- Serban, R., Hindmarsh, A.C., 2005. CVODES: the Sensitivity-Enabled ODE Solver in SUNDIALS. *Proceedings of IDETC/CIE 2005*.
- Shen, C., Niu, J., Phanikumar, M.S., 2013. Evaluating controls on coupled hydrologic and vegetation dynamics in a humid continental climate watershed using a subsurface-land surface processes model. *Water Resources Research* 49, 2552-2572.
- Shen, C., Phanikumar, M.S., 2010. A process-based, distributed hydrologic model based on a large-scale method for surface-subsurface coupling. *Advances in Water Resources* 33, 1524-1541.
- Sherman, L.K., 1932. Stream flow from rainfall by the unit graph method. *Eng. News-Rec.*, 108, p. 501–505.
- Sidle, R., Nilsson, B., Hansen, M., Fredericia, J., 1998a. Spatially varying hydraulic and solute transport characteristics of a fractured till determined by field tracer tests. Funen, Denmark. *Water Resour. Res.* 34., p. 2515–2527.

- Sidle, R., Nilsson, B., Hansen, M., Fredericia, J., 1998b. Spatially varying hydraulic and solute transport characteristics of a fractured till determined by field tracer tests, Funen, Denmark. *Water Resour. Res.* 34, p. 2515–2527.
- Šimůnek, J., He, C., Pang, J.L., Bradford, S.A., 2006a. Colloid-facilitated transport in variably-saturated porous media: numerical model and experimental verification. *Vadose Zone J.* 5, p. 1035–1047.
- Simunek, J., Jarvis, N.J., van Genuchten, M.T., Gardenas, A., 2003. Review and comparison of models for describing non-equilibrium and preferential flow and transport in the vadose zone. *Journal of Hydrology* 272, 14-35.
- Simunek, J., Sejna, M., van Genuchten, M.T., 1999. The HYDRUS-2D software package for simulating two-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media. Version 2.0. In: IGWMC-TPS-53, I.G.W.M.C., Colorado School of Mines (Ed.), Golden, Colorado, p. 251.
- Šimůnek, J., Šejna, M., van Genuchten, M.T., 1998. The HYDRUS-1D software package for simulating the movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media. Version 2.0. IGWMC-TPS-70. International Ground Water Modelling Center, Colorado School of Mines, Golden, CO.
- Simunek, J., van Genuchten, M.T., 2008. Modeling nonequilibrium flow and transport processes using HYDRUS. *Vadose Zone Journal* 7, 782-797.
- Šimůnek, J., van Genuchten, M.T., Šejna, M., 2006b. The HYDRUS Software Package for Simulating Two- and Three-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media, Technical Manual, Version 1.0. In: PC Progress, P., Czech Republic (Ed.), p. p. 241.
- Singh, G., Spencer, W.F., Van Genuchten, M.T., Kookana, R.S., 1992. Predicting pesticide transport in soil. *Pesticide Research Journal*, vol. 4(1), p. 1-10.
- Singh, V.P., 1995. Accuracy of kinematic wave and diffusion wave approximations for space-independent flows on infiltration surfaces with lateral inflow neglected in the momentum equation. *HydroL Process.*, 9, p. 783-796.
- Singh, V.P., 1997. Effect of spatial and temporal variability in rainfall and watershed characteristics on streamflow hydrograph. *Hydrolog. Process*, 11, p. 1649–1669.
- Singh, V.P., Woolhiser, D.A., 2002. Mathematical modeling of watershed hydrology. *Journal of Hydrologic Engineering* 7, 270-292.
- Sklash, M.G., Farvolden, R.N., 1979. The role of groundwater in storm runoff. *Journal of Hydrology*, 43, p. 45-65.
- Skopp, J., 1981. Comment on ‘Micro- meso- and macroporosity of soil. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 45, pp. 1246.
- Stagnitti, F., Parlange, J.-Y., Steenhuis, T.S., Nijssen, B., Lockington, D., 1994. Modeling the migration of water-soluble contaminants through preferred paths in the soils. In: Kovar, K., Soveri, J. (Eds.), *Groundwater Quality Management*. vol. 220. IAHS, Wallingford, U.K., p. 367–379.
- Suárez, L.A., 2005. A model for predicting pesticide and nitrogen fate in crop root and unsaturated zones: Users manual for release 3.12.3. *Nation Exposure Research Laboratory*, p. 426
- Sulis, M., Meyerhoff, S.B., Paniconi, C., Maxwell, R.M., Putti, M., Kollet, S.J., 2010. A comparison of two physics-based numerical models for simulating surface water-groundwater interactions. *Advances in Water Resources* 33, 456-467.

- Tang, X., Zhu, B., Katou, H., 2012. A review of rapid transport of pesticides from sloping farmland to surface waters: Processes and mitigation strategies. *Journal of Environmental Sciences* vol. 24, p. 351–361.
- Therrien, R., 2011. *HydroGeoSphere A Three-dimensional Numerical Model Describing Fully-Integrated Subsurface and Surface Flow and Solute Transport*. Laval University, Quebec, Canada.
- Therrien, R., Sudicky, E., 1996. Three-dimensional analysis of variably-saturated flow and solute transport in discretely-fractured porous media. *Journal of Contaminant Hydrology*, 23(1-2), P. 1–44.
- Thorsen, M., Jørgensen, P.R., Felding, G., Jacobsen, O.H., Spliid, N.H., Refsgaard, J.C., 1998. Evaluation of a stepwise procedure for comparative validation of pesticide leaching models. *Journal of Environmental Quality*, 27(5), p. 1183–1193.
- Tiktak, A., Hendriks, R.F., Boesten, J.J.T.I., 2011. Simulation of movement of pesticides towards drains with a preferential flow version of PEARL. *Pest Management Science*, 68, p. 290-302.
- Tiktak, A., Hendriks, R.F.A., Boesten, J.J.T.I., 2012. Simulation of movement of pesticides towards drains with a preferential flow version of PEARL. *Pest Management Science* 68, 290-302.
- Tsoukis, T., Tournemaine, F., 2008. Labour supply, growth, and inequality A Review of Socio-Macroeconomics: Status, Growth and Inequality. the 7th Annual Meeting of the European Economics and Finance Society (EEFS2008), Prague, 22-24 May 2008.
- Van Bemmelen, J.M., 1888. Die absorptionsverbindungen und das absorptionsvermögen der ackererde., p. 69-136.
- Van Den Bogaert, R., 2011a. Typologie des sols du bassin versant de la Morcille, caractérisation de leurs propriétés hydrauliques et test de fonctions de pédotransfert. UPMC. AgroParisTech, p. 55 pp.
- Van Den Bogaert, R., 2011b. Typologie des sols du bassin versant de la Morcille, caractérisation de leurs propriétés hydrauliques et test de fonctions de pédotransfert., Rapport de stage. Irstea Lyon Equipe Pollutions Diffuses, pp. p. 11-36.
- van Genuchten, M.T., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc.Am. J.* 44, 892–898.
- van Genuchten, M.T., 1985. A general approach for modeling solute transport in structured soils. In proceeding 17th International Congress IAH, Hydrogeology of rocks of low permeability., p. 513-526.
- van Genuchten, M.T., Wierenga, P.J., 1976. Mass transfer studies in sorbing porous media. I. analytical solutions. . *Soil Sci. Soc. Am.J.* 40, p. 473–480.
- Vannier, O., 2013. Apport de la modélisation hydrologique régionale à la compréhension des processus de crue en zone méditerranéenne., Ecole Doctorale Terre, Univers, Environnement. Université de Grenoble, p. 283.
- Vannier, O., Braud, I., Anquetin, S., 2014. Regional estimation of catchment-scale soil properties by means of streamflow recession analysis for use in distributed hydrological models. *Hydrological Processes* 28, 6276-6291.
- Vauclin, M., 1994. Modélisation du transport de solutés dans la zone non saturée du sol. *Journal of Water Science*, vol. 7(1), p. 81-102.
- Viallet, P., Debionne, S., Braud, I., Dehotin, J., Haverkamp, R., Saâdi, Z., Anquetin, S., Branger, F., Varado, N., 2006. Towards multi-scale integrated hydrological models using the LIQUID framework. 7th International Conference on Hydroinformatics 2006, Nice, FRA, 4-8 September 2006, pp. 542-549.
- Villholth, K., Jensen, K.H., 1998. Flow and transport processes in a macroporous subsurface-drained glacial till soil. II: Model analysis. *Journal of Hydrology*, 207, p. 121–135.

- Villholth, K.G., Jarvis, N.J., Jacobsen, O.H., De Jonge, H., 2000. Field investigations and modeling of particle-facilitated pesticide transport in macroporous soil. *J. Environ. Qual.* 29,, p. 1298–1309.
- Villholth, K.G., Jensen, K.H., Fredericia, J., 1998. Flow and transport processes in a macroporous subsurface-drained glacial till soil. I : Field investigations. *J. Hydrol.* 207, p. 98–120.
- Vogel, T., Gerke, H.H., Zhang, R., van Genuchten, M.T., 2000. Modeling flow and transport in a two-dimensional dual-permeability system with spatially variable hydraulic properties. *Journal of Hydrology*, p. 78–89.
- Voltz, M., Louchart, X., Andrieux, P., Lennartz, B., 2003. Processes of pesticide dissipation and water transport in a Mediterranean farmed catchment. *Hydrology of the Mediterranean and semiarid region*. IAHS Publication, 278, p. 422-428.
- Wallman, P., Belyazid, S., Svensson, M.G.E., Sverdrup, H., 2006. DECOMP - A semi-mechanistic model of litter decomposition. *Environmental Modelling & Software* 21, 33-44.
- Waston, S., Rahman, J., 2004. Tarsier : a particular software farmework for model developpement, testing and developpement. . *Environmental Modelling & Software*, 19, p. 245-260.
- Wehrhan, A., Kasteel, R., Šimůnek, J., Groeneweg, J., Vereecken, H., 2007. Transport of sulfadiazine in soil columns—experiments and modelling approaches. *J. Contam. Hydrol.* 89., p. 107–135.
- Werner, A.D., Gallagher, M.R., Weeks, S.W., 2006. Regional-scale, fully coupled modelling of stream aquifer interaction in a tropical catchment. *Journal of Hydrology*, 328, p. 497-510.
- Westen, S., Fortune, D., Gregersen, J., 2004. OpenMI - new opportunities for model developpers., 6th international conference on hydroinformatics, v 2, Singapore pp. p. 1827-1834.
- Windhorst, D., Kraft, P., Timbe, E., Frede, H.G., Breuer, L., 2014. Stable water isotope tracing through hydrological models for disentangling runoff generation processes at the hillslope scale. *Hydrology and Earth System Sciences* 18, 4113-4127.
- Zehe, E., Flühler, H., 2001. Preferential transport of isoproturon at a plot scale and a field-scale tile-drained site. *J. Hydrol.* 247, p. 100–115.

Annexes

Annexe (1)

Description de la méthode numérique du solveur CVODE

CVODE est un solveur pour les systèmes d'équations différentielles ordinaires rigides et non-rigides

(EDO), donnés sous forme explicite dans un espace réel N , comme suit :
$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = f(t, y) \\ y(t_0) = y \end{cases}$$

Où, $y \in \mathbb{R}^N$, t est la variable indépendante, elle représente généralement le temps.

Les méthodes utilisées dans CVODE sont à ordre variable, à étape variable ou à multi-étape (variable-order, variable-step, multistep). Le système est écrit sous la forme suivante :

$$\sum_{i=0}^{K_1} \alpha_{n,i} y_{n-1} + h_n \sum_{i=0}^{K_2} \beta_{n,i} \left(\frac{dy}{dt} \right)_{n-1} = 0$$

Avec, $y_n = y(t_n)$ et $h_n = t_n - t_{n-1}$ le pas de temps.

Pour les problèmes non-rigides, CVODE adopte la méthode d'Adams-Moulton en associant l'ordre qui varie entre 1 et 12 ($K_1=1$ et $K_2=q$; où, $1 < q < 12$). Pour les problèmes r rigides, le solveur utilise la méthode de Backward Differentiation (BDFs) dont l'ordre varie entre 1 et 5 ($K_1=q$ et $K_2=0$; $1 < q < 5$). Quelle que soit la méthode choisie, le système d'équations est donné sous la forme :

$$G(y_n) = y_n - h_n \beta_{n,0} f(t_n, y_n) - \alpha_n = 0$$

Où, $\alpha_n = \sum_{i>0} \left(\alpha_{n,i} y_{n-1} + h_n \beta_{n,i} \left(\frac{dy}{dt} \right)_{n-1} \right)$, qui doit être résolu pour chaque itération.

Par ailleurs, CVODE offre le choix des itérations fonctionnelles et à un pas de temps, adapté pour les systèmes d'équation non-rigides, et les différentes versions d'itération de Newton. Dans les cas d'un solveur linéaire direct (dense ou banded), l'itération de Newton est celle de Newton modifiée, où le jacobien est fixé. Lors de l'utilisation d'une méthode de Krylov comme étant un solveur linéaire, l'itération est une itération inexacte de Newton, en utilisant l'actuel jacobien, dans lequel le résidu linéaire est différent de zéro mais contrôlé (Cohen and Hindmarsh, 1996).

Si on considère l'itération de Newton par $y_{n,m}$ et l'itération fonctionnelle par : $y_{n,m+1} = h_n \beta_{n,0} f(t_n, y_{n,m}) + \alpha_n$, ce qui implique juste la résolution de la fonction « f ». En revanche, l'itération de Newton nécessite la résolution du système linéaire suivant :

$$M[y_{n,m+1} - y_{n,m}] = -G(y_{n,m})$$

Avec, $M \approx I - \gamma J$, $J = \frac{\partial f}{\partial y}$, et $\gamma = h_n \beta_{n,0}$

Dans les deux cas, l'estimation de la valeur initiale « $y_{n,0}$ » est calculée à partir des données historiques. En outre, pour la correction des valeurs estimées par la méthode de Newton, le solveur CVODE propose quatre choix de schémas numériques dont on cite la méthode d'approximation diagonale Jacobéenne (Brown et Hindmarsh., 1989).

Annexe (2)

Description du modèle CATHY

CATHY (Catchment Hydrology) est un modèle distribué à base physique qui simule l'évolution du front de l'humidité du sol et les échanges entre les eaux de surface et les eaux souterraines suivant un modèle pseudo3D à l'échelle des bassins versants. Le modèle a été décrit en détail par Bixio *et al.* (2000) et Camporese *et al.* (2010).

CATHY adopte l'équation de Richards 3D pour la modélisation des mouvements de l'eau dans les milieux poreux variablement saturés. La résolution numérique de l'équation de Richards 3D est menée suivant une discrétisation en éléments finis tétraédriques combinés avec le schéma d'Euler et un solveur non-linéaire de type Newton à base de Krylov avec un pas de temps adaptatif pour assurer la convergence de la solution (Paniconi and Putti, 1994). En effet, dans le module de subsurface, le pas de temps est adapté pour la convergence du schéma itératif de Picard, utilisé dans cette étude pour la linéarisation de l'équation de Richards (Sulis *et al.*, 2010).

Le ruissellement est régi dans CATHY à l'aide d'une équation unidimensionnelle de l'onde diffusante suivant une discrétisation en différences finies. Le modèle décrit à la fois la propagation des écoulements à surface libre dans le versant, les cours d'eau, les ruisseaux et les canaux courants, les lacs et ainsi que les écoulements concentrés. La résolution de cette équation se base sur le schéma de Muskingum-Cunge avec adoption des coefficients de rugosité différents (Orlandini and Rosso, 1998) en spécifiant les types d'écoulement de surface dans le versant et dans le réseau hydrographique selon l'approche « Constant critical support area » (Montgomery and Foufoula-Georgiou, 1993). Le module permet l'estimation de la réponse hydrologique du BV en surface sur les versants et dans le réseau hydrographique, en introduisant le stockage et les effets de retardation des lacs et des dépressions.

Le couplage surface-subsurface est basé sur une procédure de commutation des conditions aux limites qui partitionne automatiquement les flux potentiels en flux réels à travers la surface, et calcule le changement du stockage de la surface. Le modèle prend donc en compte l'infiltration et l'exfiltration de l'eau dans le sol et calcule la hauteur d'eau ruisselée, qu'il interprète comme une condition à la limite de surface. La rétention de l'eau dans le sol est décrite par les modèles de van Genuchten (1985), Brooks and Corey (1964) ou à l'aide de l'expression de Huyakorn *et al.* (1984).

La discrétisation spatiale est donnée suivant un maillage rectangulaire basé sur le classement des éléments du paysage en deux classes : type « terrain » qui se draine vers des cellules de type « cours d'eau ». La direction de drainage est faite suivant un simple régime D8 (une des huit entrées / évacuation des directions est prise sur chaque cellule). Cependant, le découpage souterrain est moins détaillé, permettant de regrouper plusieurs unités de surface dans la même unité souterraine sous forme de prisme (Guay *et al.*, 2012).

Le modèle a été validé sur six applications, qui ont validé l'échange surface-subsurface à l'échelle d'un bassin versant (Guay *et al.*, 2012). Les deux premières demandes face à un bassin versant synthétique simple contenant un lac et offrant trois versants de géométrie différente. Les autres applications concernent les bassins versants réels de taille 4, 64, 111, et 356 km², qui sont caractérisés par une morphologie complexe, de vastes dépressions de surface naturelles, et une hétérogénéité régionale, respectivement. Une autre application a été menée sur un bassin de 3,4 ha en amont de la rivière Vauz situé dans les Alpes orientales italiennes, pour lesquelles des données complètes de l'écoulement fluvial, nappe phréatique, et l'humidité du sol sont disponibles (Camporese *et al.*, 2010).

Annexe (3)

Description de Hydrus2D

Hydrus2D (Simunek et al., 2011) est un modèle à deux dimensions dédié à la description du transport de l'eau, de la chaleur, et des solutés dans des milieux variablement saturés. Le modèle est discrétisé spatialement suivant la méthode des éléments finis et temporellement suivant la méthode des différences finies.

Le modèle Hydrus2D adopte l'équation de Richards pour la modélisation du transport d'eau dans les terrains stratifiés variablement saturés, en considérant un mouvement darcien uniforme isothermique, comme suit :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \left(K_{ij}^A \frac{\partial h}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) \right] - S$$

Où, θ [L^3L^{-3}] est la teneur volumique d'eau ; h [L] est le potentiel matriciel; x_i ($i=1,2$) [L] sont les coordonnées spatiales ; t [T] est le temps; K_{ij}^A [LT^{-1}] sont les composantes du tenseur anisotrope à plusieurs dimensions ; et K [LT^{-1}] est la fonction de la conductivité hydraulique à la non-saturation, donnée par la formule suivante :

$$K(h, x, y, z) = K_s(x, y, z) + K_r(h, x, y, z)$$

Où, K_r [LT^{-1}] est la conductivité hydraulique relative ; et K_s [LT^{-1}] est la conductivité hydraulique à saturation.

L'estimation du ruissellement dans Hydrus2D est donnée par l'accumulation de l'eau à la surface du sol. Hydrus2D suppose que toute l'eau au-delà de la capacité d'infiltration est immédiatement perdue dans le ruissellement de surface.

