



**HAL**  
open science

# Assimilation de données pour améliorer les modèles de qualité de l'eau : vers un indicateur de pression azotée

Samy Chelil

► **To cite this version:**

Samy Chelil. Assimilation de données pour améliorer les modèles de qualité de l'eau : vers un indicateur de pression azotée. Hydrologie. Sorbonne Université, 2022. Français. NNT : 2022SORUS440 . tel-04002067

**HAL Id: tel-04002067**

**<https://theses.hal.science/tel-04002067>**

Submitted on 23 Feb 2023

**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.

## Sorbonne Université

Ecole doctorale Géosciences, Ressources Naturelles et Environnement

Equipe ARTEMHYS (INRAE Jouy-en-Josas, Antony) - Equipe G-EAU (INRAE Montpellier)

### **Assimilation de données pour améliorer les modèles de qualité de l'eau : vers un indicateur de pression azotée**

Par Samy CHELIL

Thèse de doctorat en hydrologie

Dirigée par Julien TOURNEBIZE et Pierre Olivier MALATERRE

Co-encadrée par Hind OUBANAS et Hocine HENINE

Présentée et soutenue publiquement le 09/12/2022

#### **Devant un jury composé de :**

<b>Josette GARNIER</b> , Directrice de recherche, Sorbonne Université (METIS)	Présidente
<b>Sabine SAUVAGE</b> , Ingénieure de recherche, CNRS (ECOLAB)	Rapportrice
<b>Sophie RICCI</b> , Chargée de recherche, CNRS (CERFACS)	Rapportrice
<b>Julien TOURNEBIZE</b> , Ingénieur de recherche, INRAE (HYCAR)	Directeur de thèse
<b>Pierre Olivier MALATERRE</b> , Ingénieur en chef, INRAE (G-EAU)	Co-directeur de thèse
<b>Hind OUBANAS</b> , Ingénieure de recherche, INRAE (G-EAU)	Encadrante
<b>Hocine HENINE</b> , Ingénieur de recherche, INRAE (HYCAR)	Encadrant
<b>Marie Pierre ARLOT</b> , Chargée de mission, INRAE	Invitée





*"Tous les modèles sont faux, certains sont utiles."*

*G. Box*



## REMERCIEMENTS

Une thèse de doctorat est assimilable à une épreuve de marathon courue en solitaire. Au départ, le doctorant progresse à un rythme assez stable mais soutenu. Il parcourt les premiers kilomètres de sa quête intellectuelle en explorant les revues bibliographiques tout en portant sa réflexion sur la méthodologie à mettre en place. Peu à peu, il prend confiance en ses capacités et commence à implémenter sa méthode avec plus d'assurance.

Tout comme un athlète, le doctorant ou « thésard » sera inévitablement confronté à des moments de doute et d'incertitude, mais grâce à sa persévérance, il parvient finalement à obtenir son premier résultat notable ! Quel bonheur ! Cela lui procure encore plus de motivation pour poursuivre sa course à un rythme encore plus soutenu.

A partir de ce moment-là, le doctorant a plus de chances de franchir la ligne d'arrivée, même s'il ne sait pas quand exactement il pourra finir sa course. C'est à ce moment précis qu'il doit faire face à l'ultime épreuve de force mentale. Heureusement, il peut compter sur le soutien et les encouragements de son mentor, de son entourage proche, de sa famille et de ses amis pour maintenir son rythme et se concentrer sur la ligne d'arrivée.

Ma thèse de doctorat a été menée au sein de l'Institut National de Recherche pour l'Agriculture, l'Alimentation et l'Environnement (INRAE) grâce à la collaboration de deux centres d'excellence : Antony (équipe ARTEMHYS) et Montpellier (équipe GHOSTE).

Je tiens à exprimer ma plus sincère gratitude à toutes les personnes qui ont contribué, de près ou de loin, à la réalisation de cette thèse. Tout d'abord, je tiens à remercier mon directeur de thèse, Julien TOURNEBIZE, pour son soutien constant, ses précieux conseils et sa confiance en moi. Tu as su m'accompagner à travers les eaux troubles, menant ainsi avec brillance le navire jusqu'au port en toute sérénité. Je tiens également à remercier mon co-directeur de thèse, Pierre Olivier MALATERRE, pour sa présence lors de nos réunions d'avancement et pour la correction de mes rendus. Tes remarques constructives m'ont beaucoup aidé et m'ont permis d'améliorer la qualité de mon travail.

Tout le mérite revient également à l'équipe d'encadrement. Merci à mon encadrant Hocine HENINE pour m'avoir accompagné tout au long de mon parcours et pour avoir consacré du temps à la lecture et à la correction de mes rendus. Son expertise en modélisation hydraulique et en drainage agricole a été déterminante pour le développement et la validation du nouveau modèle de transfert de nitrate en milieu drainé « NIT-DRAIN ». Je n'oublierai jamais les séances d'initiation à l'apiculture et tout ce que j'ai appris grâce à son expérience dans ce domaine. Je remercie également mon encadrante Hind OUBANAS pour son engagement dans mes travaux de thèse. Je n'aurais jamais pu accomplir ce travail sans ses considérables efforts de déplacement à Paris. Ainsi, j'ai pu bénéficier d'une formation d'excellence en matière d'assimilation de données grâce à sa générosité, son talent inouï en matière de transfert de connaissances et son expertise dans ce domaine. Ce sont, bien évidemment, les mains cachées d'Igor GEJADZE (chercheur et expert en assimilation de données) qui ont orchestré

l'implémentation de cette technique sur les modèles de drainage SIDRA-RU et NIT-DRAIN.  
Un grand Merci à toi Igor.

Je remercie également les membres du jury d'avoir accepté d'évaluer mon travail de thèse. Je les remercie pour avoir consacré leur précieux temps à lire et à évaluer la qualité de mon manuscrit et de mon oral lors de la soutenance de thèse. Merci aux membres du comité de suivi, Vincent THIEU, Claire LAUVERNET et Rémi DUPAS pour avoir pris part à l'évaluation de l'avancement de mes travaux de recherche. Les échanges constructifs que nous avons eus chaque année et qui ont abouti à de précieux commentaires et remarques, m'ont permis d'améliorer mes résultats et d'imaginer de nouvelles perspectives de travail.

Je ne peux pas ne pas remercier mes collègues au centre d'Antony. Merci à Cédric CHAUMONT pour avoir assuré l'importante tâche de collecte et de prétraitement des données de terrain que j'ai utilisées pour le développement et la validation des modèles de drainage. Je remercie également tous les membres de l'équipe ARTEMHYS. Un grand merci à Alexis JEANTET, mon co-bureau pendant toutes ses années de thèse. Ensemble, nous avons fondé le « SIDRA-Office », un endroit idéal pour cumuler science et savoir mais aussi pour s'évader et changer d'air le temps d'une chronique France-Inter ou d'une chanson mythique. Merci pour tous ces bons moments que nous avons partagés ensemble dans ce merveilleux bureau. Merci à Aya d'avoir su égayer les couloirs du bâtiment Lavoisier avec sa joie et sa bonne humeur. Je remercie Alexandre pour sa gentillesse. Fort serviable, je ne doute pas une seule seconde de la manière avec laquelle il va pouvoir gérer la cafetière de l'équipe ! Je remercie également tous les membres de l'unité HYCAR et à leur tête Vazken ANDREASSIAN et Charles PERRIN. Merci à Olivier DELAIGUE pour ses conseils en programmation et traitement de données. Un grand merci à tout le groupe des doctorants du centre INRAE Antony.

Je suis très reconnaissant envers mes parents qui ont toujours été présents pour m'accompagner et m'encourager tout au long de cette course. Leur soutien inconditionnel m'a permis de rester debout et de tenir bon rien que pour franchir la ligne d'arrivée et voir la joie dans leurs yeux. Un grand merci à vous « Mama & Papa ».

Mes sincères remerciements vont naturellement à mon bras droit et ma moitié pour son soutien constant et son amour inconditionnel. Nous étions deux avant le début de la thèse et nous voilà maintenant trois avec l'arrivée de Younes dans notre vie, ajoutant à notre foyer un mélange parfait d'ambiance, d'énergie, de gaieté innocente et de sourires contagieux. Tous les deux, vous illuminez chaque jour de ma vie avec votre enthousiasme et votre amour.

Mes remerciements les plus forts vont à mes deux frères Wassim et Nabil pour leur amour et leur soutien tout au long de cette aventure de thèse. Merci également à mon ami proche et fidèle frère Omar REZIG à qui je souhaite tout le bonheur du monde.

## Résumé de thèse

---

L'exposition de la ressource en eau naturelle (cours d'eau, nappe souterraine) à la pollution azotée diffuse dans un contexte agricole est due essentiellement à la surfertilisation des parcelles agricoles à des fins d'amélioration du rendement des cultures. Malgré des efforts considérables menés à différentes échelles pour optimiser les pratiques culturales, le surplus azoté du sol présente un risque élevé de lixiviation des nitrates vers les milieux aquatiques notamment en début de la saison hivernale. En effet, l'absence des cultures piège à nitrate (CIPAN) en cette période, la forte minéralisation du sol souvent laissé à nu en été, et la gestion peu maîtrisée des apports azotés en printemps augmentent la quantité d'azote piégé en faible profondeur du sol aggravant, ainsi, son exportation vers l'extérieur du système de drainage avec l'arrivée des premières pluies hivernales.

Ce travail de thèse vise à développer un indicateur de pression azoté basé sur la modélisation conceptuelle des transferts de nitrate en parcelles agricoles artificiellement drainées.

Dans un premier temps, le modèle conceptuel NIT-DRAIN (intégrant sept paramètres d'entrée) a été développé, optimisé et validé pour simuler la lixiviation des nitrates à l'exutoire des bassins versants agricoles artificiellement drainés. Puis, sa robustesse spatiotemporelle a été évaluée en utilisant des données de concentration en nitrates mesurées à des pas de temps fins (horaire, journalier) sur trois sites hétérogènes en terme de superficie et de pratiques agricoles (La Jaillière, 1 ha ; Chantemerle, 36 ha ; Rampillon, 355 ha). Notons que seuls les paramètres du modèle ainsi que le débit de drainage sont nécessaires pour estimer les reliquats azotés en entrée d'hiver (REH) sous réserve de disponibilité des observations de concentration en nitrate à l'exutoire du bassin versant agricole étudié.

Deux méthodes d'analyse de sensibilité (locale et globale) ont été implémentées afin de déterminer l'influence des paramètres du modèle sur les concentrations en nitrates (sortie du modèle). Les résultats indiquent que les paramètres responsables de la vitesse de transfert des nitrates ' $vl$ ' et du partage de la quantité initiale d'azote présent dans le sol ' $\alpha$ ', impactent de manière significative les sorties du modèle.

La technique d'assimilation de données variationnelle (4D-Var) a été implémentée au modèle NIT-DRAIN afin d'améliorer l'estimation du REH et plus généralement de l'évolution temporelle du stock d'azote dans le sol à partir d'un échantillonnage des concentrations en nitrate à l'exutoire du réseau de drainage. Plusieurs fréquences d'échantillonnage ont été



sélectionnées (ex. horaire, journalière, mensuelle, trimestrielle) afin d'évaluer leur impact sur les estimations du REH. Ainsi, il a été démontré que l'erreur sur l'estimation du REH devient conséquente à partir d'une fréquence d'échantillonnage mensuelle.

Finalement, la performance du modèle de simulation de drainage (SIDRA-RU) a été étudiée en perspective d'un futur couplage avec le modèle nitrate (NIT-DRAIN). Pour ce faire, l'adjoint du modèle SIDRA-RU a été généré à l'aide de TAPENADE (outil de différentiation automatique) afin d'implémenter la méthode d'assimilation de données variationnelle. A terme, le modèle NIT-DRAIN utilisera comme donnée d'entrée les simulations du débit de drainage obtenues par le modèle SIDRA-RU à la place des observations.

**Mots clés :** assimilation de données variationnelle, 4D-VAR, modèle conceptuel, lixiviation des nitrates, reliquat entrée hiver, drainage agricole souterrain, analyse de sensibilité, optimisation

## Thesis abstract

---

Non-point sources of nitrogen pollution in the agricultural context are mainly due to the over-fertilization of agricultural fields for crop yield improvement. Regardless of the considerable efforts made at various levels to optimize the cultural management practices, the nitrogen surplus in the soil may constitute a high potential for nitrate leaching towards freshwater resources, especially at the beginning of the winter season. Indeed, the lack of catch crops during this period, the high soil mineralization levels (often left bare in summer and fall seasons), and the uncontrolled nitrogen management practices increase the soil nitrogen pool, leading to extreme nitrate exportations following the first winter precipitations.

This thesis work aims to develop a new nitrate index based on conceptual modeling of nitrate transfer through agricultural subsurface drained soils.

First, the conceptual NIT-DRAIN model was developed, optimized, and validated to simulate nitrate leaching through agricultural subsurface drained catchments. Then, its spatiotemporal robustness was assessed based on observed nitrate concentrations data at different time steps (hour, days), collected at three agricultural fields (La Jaillière, 1 ha; Chantemerle, 36 ha; Rampillon, 355 ha). One can note that only the seven input parameters and drainage discharge data are needed to estimate the remaining pool of nitrate at the beginning of the winter season (RNBW) as function of the measured nitrate concentrations at the subsurface drainage outlet.

Two adjoint sensitivity analyses (local and global) have been implemented to determine the influence of the model parameters on the nitrate concentrations (model output). Results indicate that nitrate transfer velocities ( $vl$ ) and the nitrogen-sharing factor ( $\alpha$ ) parameters show a significant impact on the model output.

The variational data assimilation method (4D-Var) has been implemented on the NIT-DRAIN model to enhance the RNBW estimations and the temporal evolution of the soil nitrogen pool. In addition, an ensemble of sampling frequency of nitrate concentration observations has been considered (e.g., hour, day, month, quarter) to assess their impact on the RNBW estimations. Thus, it has been shown that RNBW estimation errors become substantial starting from a monthly sampling of nitrate concentrations data.

Finally, the performance of the drainage simulation model (SIDRA-RU) has been evaluated in the prospect of a future coupling with the nitrate model (NIT-DRAIN). Hence, the adjoint code of the SIDRA-RU model has been generated using the automatic differentiation tool

TAPENADE to facilitate the implementation of the variational data assimilation method. In the near future, we seek to avoid the need for the observed drainage discharge used as input of the NIT-DRAIN model by considering the simulated SIDRA-RU drainage data.

**Keywords:** variational data assimilation, 4D-VAR, conceptual model, nitrate leaching, agricultural subsurface drainage, sensitivity analysis, optimization

## Table des matières

---

Résumé de thèse .....	I
Thesis abstract .....	III
Table des matières .....	V
Table des figures .....	IX
Liste des tableaux .....	XII
Introduction générale.....	1
Objectifs scientifiques de la thèse .....	2
Organisation du manuscrit de thèse .....	3
Partie I - Etat de l'art.....	6
Chapitre I.1 : La pollution azotée.....	7
I.1.1 Contexte général.....	7
I.1.2 Le cycle d'azote : quand les apports anthropiques deviennent prépondérants ....	8
I.1.3 Réduire la pollution azotée : contexte réglementaire .....	9
I.1.4 La gestion maîtrisée des apports azotés .....	10
I.1.5 La mesure des reliquats azotés, intérêt et attentes.....	11
I.1.6 La lixiviation des nitrates .....	12
I.1.7 Fonctionnement du drainage agricole .....	13
I.1.8 La pollution azotée en contexte de drainage agricole .....	14
Chapitre I.2 : Modélisation des transferts .....	16
I.2.1 Approches de modélisation .....	16
I.2.2 Modélisation de la double perméabilité du sol en présence du drainage .....	17
I.2.3 Les modèles de drainage agricole .....	18
I.2.4 L'analyse de sensibilité .....	20
I.2.5 L'assimilation de données.....	21

Conclusion de la partie I.....	23
Partie II - Développement et validation du modèle NIT-DRAIN .....	25
Chapitre II.1 : Genèse du modèle nitrate « NIT-DRAIN » .....	26
II.1.1 Introduction .....	26
II.1.2 Présentation des données et du site d'étude .....	26
II.1.3 Hypothèses de modélisation.....	28
II.1.3.1 Variabilité de la concentration en nitrate .....	28
II.1.3.2 La période hivernale, un moteur de la lixiviation des nitrates .....	30
II.1.3.3 Décomposition de l'espace « drain-interdrain » en un ensemble de compartiments .....	31
II.1.3.4 Description des phénomènes d'entraînement et de dilution des nitrates ....	31
II.1.3.5 Considération de la dynamique journalière des flux de nitrate.....	33
II.1.3.6 Décomposition du débit de drainage en plusieurs contributions .....	33
II.1.4 Développement du modèle.....	35
II.1.4.1 Fonctions de transfert des nitrates dans le sol.....	35
II.1.4.2 Approche de modélisation par réservoirs .....	38
II.1.5 Bilan des tests de performance sur les quatre approches de modélisation.....	49
Chapitre II.2 : Le modèle NIT-DRAIN pour simuler les concentrations en nitrate et la lixiviation en parcelles agricoles artificiellement drainées .....	51
Chapitre II.3 : Robustesse du modèle de transfert des nitrates en milieu agricole artificiellement drainé : NIT-DRAIN.....	67
II.3.1 Introduction .....	68
II.3.2 Matériels et méthodes.....	70
II.3.2.1 Description des sites d'étude .....	70
II.3.2.2 Les données utilisées.....	71
II.3.2.3 Stratégie d'évaluation de la robustesse du modèle .....	73
II.3.2.4 Critères d'évaluation des performances du modèle .....	74
II.3.3 Résultats .....	75

II.3.3.1	La robustesse du modèle .....	75
II.3.3.2	Qualité des REH estimés .....	80
II.3.4	Discussion et conclusions.....	81
	Conclusion de la partie II .....	84
Partie III -	Assimilation de données variationnelle, application aux modèles de transfert de l'eau et de l'azote en contexte de drainage agricole.....	86
Chapitre III.1 :	L'assimilation de données variationnelle pour améliorer les paramètres d'entrée d'un modèle de drainage agricole .....	91
Chapitre III.2 :	Le potentiel de l'assimilation de données variationnelle quant à l'amélioration de l'estimation du stock d'azote potentiellement lixiviable du sol : cas du modèle NIT-DRAIN .....	110
	Conclusion de la partie III.....	150
IV -	Discussion et conclusion générale.....	152
IV.1 :	Rappel des objectifs de la thèse .....	152
IV.2 :	Discussion des principaux résultats .....	153
IV.2.1	Le modèle NIT-DRAIN .....	153
IV.2.2	La robustesse du modèle NIT-DRAIN.....	157
IV.2.3	L'impact de la fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrate .....	157
IV.2.4	Vers une estimation simplifiée du REHe .....	158
IV.2.5	La valeur ajoutée de l'assimilation de données variationnelle.....	161
IV.3 :	Perspectives.....	163
IV.3.1	La qualité des débits simulés.....	163
IV.3.2	Vers un futur couplage du modèle SIDRA-RU avec NIT-DRAIN .....	163
IV.3.3	Le besoin d'une étude poussée de la robustesse du modèle NIT-DRAIN.....	164
IV.3.4	Prise en compte d'une nappe permanente sous le réseau de drainage .....	165
IV.3.5	Modéliser le transfert des pesticides avec l'approche NIT-DRAIN .....	166
IV.4 :	La thèse en quelques phrases .....	167

Références .....	168
Annexe .....	180

## Table des figures

---

Figure 1: Schéma synthétisant les données à disposition, la localisation des sites d'étude ainsi que le lien existant entre les deux modèles exploités .....	5
Figure 2: Origines des apports en azote réactif. D'après Payraudeau (2002) .....	9
Figure 3: Schéma illustrant la nécessité de trouver un équilibre entre apport azoté, besoin alimentaire et rendement agricole .....	10
Figure 4: Fonctionnement du drainage agricole. A gauche, absence du drainage. A droite, meilleur développement de la culture dû à la présence du drainage .....	14
Figure 5: Schématisation du mouvement d'un soluté dans l'espace "drain-interdrain". La courbe rouge indique la neutralité du rapport des vitesses de transfert (horizontal/vertical) ; au-dessus/au-dessous de cette courbe la composante verticale/horizontale de la vitesse est dominante. Adapté de Paris (2004) .....	18
Figure 6: Localisation de la zone d'étude (Bassin versant agricole de Chantemerle) .....	26
Figure 7: Dispositif de mesure de hauteur d'eau (seuil triangulaire), installé à l'exutoire du bassin versant agricole de Chantemerle .....	27
Figure 8: La variabilité horaire des concentrations en nitrate .....	29
Figure 9: La transformation des données de concentration en nitrate d'un pas de temps 15 min "rouge" en pas de temps journalier "bleu". Données observées sur le site de Gobard « Chantemerle » .....	29
Figure 10: Les courbes de cumul annuel des flux de nitrate, exprimés par leurs fréquences au dépassement.....	30
Figure 11: Description de la partie responsable des transferts rapides (proche du drain) et celle responsable des transferts lents (loin du drain). La distance entre deux points situés sur la même ligne de courant est équivalente à une heure de transfert ; (Branger et al., 2009) adapté .....	31
Figure 12: Schéma simplifié présentant à gauche l'effet d'entraînement et à droite l'effet de dilution des nitrates ; D'après Arlot (1999).....	32
Figure 13: Exemple d'un couplage d'une modélisation saisonnière et événementielle des concentrations d'un soluté résidant en fond de nappe (Arlot, 1999) adapté.....	33
Figure 14: Décomposition typique d'un débit total en somme d'un débit de base « Baseflow » et d'un fort débit « Quickflow » ; d'après Rs (2005).....	34
Figure 15: Différentes approches réservoirs pour caractériser le transfert des nitrates en sol drainé; (a) un seul réservoir ; (b) deux réservoirs non connectés en parallèle (le	



mélange s’effectue à l’exutoire de ces derniers); (c) deux réservoirs en série (d) trois réservoirs en série.....	38
Figure 16: Schéma simplifié du réservoir de lessivage R et des principales variables et paramètres qui rentrent en jeu pour simuler le flux et les concentrations de nitrate.....	39
Figure 17: Concentration en nitrate simulées en utilisant l’approche de base.....	41
Figure 18: Flux de nitrate simulés en utilisant l'approche de base.....	42
Figure 19: Les concentrations en nitrate simulées en utilisant l'approche à deux réservoirs en parallèle.....	45
Figure 20: Les concentrations en nitrate simulées en se basant sur l'approche à deux réservoirs en série.....	46
Figure 21: La corrélation entre les concentrations en nitrate observées et simulées en se basant sur l’approche de modélisation à deux réservoirs en série.....	47
Figure 22: Zoom sur les concentrations en nitrate simulées durant la saison de drainage intense 2010/2011.....	47
Figure 23: Les concentrations en nitrate simulées en utilisant l'approche à trois réservoirs en série.....	49
Figure 24: Localisation des sites d’étude et pourcentage de drainage par canton (Agreste, 2010).....	70
Figure 25: Proportions culturales dans chaque site étudié : (A) Rampillon entre 2014 et 2020 (AQUITBrie, n.d), (B) Gobard entre 2008 et 2012 (ORACLE, 2013) et (C) La Jaillièrre en 1989, 1990, 1993 et 1994 (ARVALIS, 2021).....	71
Figure 26: En haut nous proposons une vue aérienne des sites : Rampillon (Tournebize et al., 2017), Gobard (Tournebize et al., 2015) et La Jaillièrre (ARVALIS, 2021) et en bas de la figure, un schéma qui montre la stratégie de calage du modèle NIT-DRAIN permettant de vérifier sa robustesse spatiotemporelle.....	74
Figure 27: Comparaison des concentrations (A, C, E) et des flux de nitrate (B, D, F) observés et simulés par le modèle NIT-DRAIN obtenues suite au calage interannuel des paramètres sur les années hydrologiques 2017-2018 (Rampillon ; A, B), 2011-2012 (Gobard ;C, D), 1990-1991 (La Jaillièrre ;E, F).....	76
Figure 28: Corrélation entre les valeurs observées et simulées des concentrations (A, C, E) et des flux (B, D, F) de nitrate issues des calages interannuels des paramètres effectués pour chaque site : Rampillon (A, B), Gobard (C, D) et La Jaillièrre (E, F).....	77
Figure 29: Schéma récapitulatif des paramètres estimés par le modèle NIT-DRAIN (A) suivant les différentes stratégies de calage. Les boîtes à moustache correspondent aux	

variabilités annuelles des paramètres alpha (B), v11 (C), v12 (D), v13 (E), p1 (F), p2 (G) et p3 (H). Les points bleus et rouges correspondent aux valeurs de paramètre issues du calage interannuel et au jeu de paramètres unique, respectivement.....	79
Figure 30: Comparaison des REH mesurés (bleu) avec les REH estimés suivant un calage interannuel des paramètres (orange) et à partir du jeu de paramètres unique (gris) sur chacun des sites étudiés.....	81
Figure 31: Schéma simplifié explicitant le fonctionnement du 4D-Var sur un cas de modélisation conceptuelle .....	88
Figure 32: Ensemble de graphiques montrant l'existence d'une potentielle corrélation entre le début de la saison de drainage intense et la date correspondante au passage d'un comportement d'entraînement à celui d'une dilution des nitrates. (I) Courbe de double cumul (pluie-débit), les données ont été mesurées sur le site de Rampillon durant la saison hydrologique 2017-2018. (II) Evolution du stock des nitrates dans chaque compartiment conceptuel du modèle NIT-DRAIN. (III) Chroniques de concentrations en nitrate observées (bleu), simulées (orange) et de débit de drainage (gris) .....	156
Figure 33: Statistique mensuelle sous forme de boxplot sur les erreurs relatives des REHe estimés suivant une fréquence d'échantillonnage trimestrielle ; N correspond au nombre de données (concentrations en nitrate) – Site de Rampillon – Période 2014-2019.....	160

## Liste des tableaux

---

Tableau 1: Comparaison des valeurs de REH mesurées et estimées avec l'approche de base à un réservoir.....	41
Tableau 2: Valeurs des paramètres après ajustement avec l'approche à deux réservoirs en parallèle .....	44
Tableau 3: Comparaison des valeurs de REH mesurées et estimées avec l'approche à deux réservoirs en parallèle.....	44
Tableau 4: Paramètres ajustés avec l'approche à deux réservoirs en série .....	46
Tableau 5: Comparaison des valeurs de REH mesurées et estimées avec l'approche à deux réservoirs en série.....	46
Tableau 6: Les paramètres ajustés avec l'approche à trois réservoirs en série .....	48
Tableau 7: Comparaison des valeurs de REH mesurées et estimées en se basant sur l'approche à trois réservoirs en série.....	48
Tableau 8: Comparaison des valeurs moyennes des concentrations et flux de nitrate (**calculé de septembre à février) ainsi que des REH obtenus après (1) un calage interannuel des paramètres sur chacun des sites et (2) à partir du jeu de paramètres unique moyenné sur les trois sites étudiés. *L'année 1994 présente des lacunes de suivis du Nitral.....	73
Tableau 9: Récapitulatif des critères de performance obtenus sur chaque site et suivant les trois stratégies de calage .....	78
Tableau 10: Comparaison entre les reliquats entrée hiver mesurés à Rampillon et ceux calculés suivant la formule exponentielle (IV.2) .....	160

## Introduction générale

---

La pollution azotée par sa forme soluble figure parmi les plus fréquentes voies de contamination des milieux aquatiques (Dressing, 2003). A l'heure où les sources ponctuelles de pollution sont souvent facilement identifiables et quantifiables en amont (ex. rejets des stations d'épuration ou des usines), la pollution azotée diffuse d'origine agricole est beaucoup plus complexe à gérer. En effet, la vitesse de transfert de ce type de pollution depuis la surface des parcelles agricoles peut être fortement modulée par la macroporosité du sol (Frey et al., 2016), la présence ou non du drainage agricole (Arlot, 1999) et la variabilité spatiale de la pluie (Chaubey et al., 1999). De même, l'évolution de la quantité de nitrate à faible profondeur du sol est corrélée à un ensemble de processus biogéochimiques constituant le cycle complexe de l'azote. Parmi ces processus nous pouvons citer la minéralisation de la matière organique, la nitrification rapide de l'ammoniac, la dénitrification, l'assimilation par les plantes ou encore la déposition directe des nitrates par les eaux de pluie.

Au début du 20<sup>ème</sup> siècle, la fixation industrielle de l'azote devient possible grâce au procédé de Fritz Bosch (Smil, 2004). La production industrielle de l'engrais azoté sous sa forme minérale constitue le principal résultat de cette révolution. Ainsi, son épandage généralisé sur les sols des parcelles agricoles, dans le but d'améliorer le rendement, est nécessaire pour subvenir à la demande alimentaire croissante de la population (Leghari et al., 2016). En contrepartie, une surfertilisation des sols agricoles engendre un surplus azoté important qui peut rapidement être entraîné vers les nappes souterraines ou les eaux de surface par le drainage naturel ou artificiel de l'eau. Ce surplus est généralement amplifié par une minéralisation de la matière organique lors des périodes de fortes températures (Stanford et al., 1973; Galloway et al., 2003), particulièrement entre la fin du printemps et le début de l'automne dans les climats océaniques altéré (ex. Ile de France). En somme, la pression azotée d'un sol agricole varie fortement d'une saison à une autre, mais présente généralement un stock d'azote important en début d'hiver. Ce dernier est potentiellement lixiviable par les fortes pluies hivernales.

L'analyse d'un échantillon du sol extrait à l'aide d'une tarière constitue l'une des principales méthodes qui existent pour suivre ponctuellement l'évolution du stock d'azote dans le sol de surface (0 – 90 cm). La quantification de l'azote nitrique du sol s'effectue à des périodes spécifiques de l'année. En effet, les reliquats azotés de sortie d'hiver (RSH) et de post-récolte (RPR) permettent de quantifier l'azote du sol afin d'ajuster les apports azotés et optimiser ainsi le rendement agricole. Le reliquat entrée hiver (REH), porté par sa dimension

environnementale, définit la quantité d'azote nitrique présent à faible profondeur du sol en début d'hiver. Idéalement, le REH doit être mesuré avant l'arrivée des premières pluies hivernales (Vandenberghe et al., 2013). En effet, les premières couches du sol sont généralement très chargées en nitrate durant cette période, ce qui augmente considérablement le risque de lixiviation en profondeur par effet d'entraînement. A l'heure actuelle, la donnée « REH » est très peu accessible malgré le rôle important qu'elle occupe dans la description de la quantité d'azote potentiellement lixiviable en début d'hiver, dans le but de réduire les fuites d'azote vers les milieux naturels. De plus, la mesure rare et ponctuelle du REH est difficilement généralisable à plus grande échelle compte tenu de l'hétérogénéité locale des pratiques agricoles et des textures du sol.

### **Objectifs scientifiques de la thèse**

---

Les méthodes classiques d'échantillonnage du sol, dont l'objectif est d'identifier la quantité d'azote potentiellement lixiviable, présentent un certain nombre d'avantages. Nous pouvons noter la représentativité de la mesure à l'endroit de prélèvement et plus généralement à l'échelle de la parcelle agricole où le prélèvement est effectué. Un fort gradient de reliquat azoté pourrait être observé d'une parcelle agricole à une autre, cela en fonction de plusieurs facteurs, notamment ceux liés à la rotation culturale et à la fertilisation. Pour prendre en compte cette hétérogénéité spatiale, il faudrait multiplier la fréquence des mesures sur les différentes parcelles agricoles concernées. Ce type d'approche peut donc créer débat tant pour son coût excessif que pour la complexité d'obtention des mesures représentatives sur une échelle spatiale plus importante que celle de la parcelle agricole.

Actuellement, une meilleure considération des risques de lixiviation des nitrates, dans les sols agricoles drainés par des tuyaux enterrés, vers les milieux aquatiques s'avère plus que nécessaire. Cela permettra d'adapter plus facilement les pratiques agricoles dans le but de concilier entre le rendement agricole et la protection de l'environnement. Dans cette optique, pourrions-nous concevoir un modèle de qualité de l'eau capable à la fois de simuler avec précision les exportations azotées mais aussi d'estimer les reliquats azotés avec le minimum d'incertitude ? Partant du principe que le fonctionnement des réseaux de drainage agricole peut être assimilé à celui d'un lysimètre à grande échelle, nous pouvons émettre l'hypothèse que le stock d'azote dans le sol d'une parcelle ou d'un groupe de parcelles peut être estimé à partir des mesures de concentration en nitrates à son exutoire.

Le premier objectif de la thèse consiste à développer un modèle conceptuel (NIT-DRAIN) permettant une meilleure simulation des concentrations en nitrate à l'exutoire d'un réseau de drainage agricole. Le modèle doit être robuste, intégrant peu de paramètres d'entrée et proposant une quantification simplifiée de la variation du stock d'azote dans le sol. De plus, nous proposons d'intégrer un indicateur de pression azotée comme variable d'entrée du modèle dont le but est d'évaluer les reliquats azotés en entrée d'hiver avec le minimum d'incertitude. Ensuite, la méthode d'assimilation de données variationnelle sera implémentée au modèle nitrate (NIT-DRAIN) dans le but d'améliorer l'estimation du stock d'azote dans le sol. Dès lors, nous définirons le terme reliquat entrée hiver équivalent (REHe) comme étant la valeur du stock d'azote estimée par le modèle en début d'hiver. Il est à noter que les valeurs de REHe sont représentatives de l'échelle spatiale à laquelle les données de débit et des concentrations en nitrate sont échantillonnées.

Contrairement au débit, les données de concentration en nitrate sont souvent échantillonnées à des pas de temps très larges (ex. hebdomadaire, mensuel). Cette contrainte est à prendre en considération dans le modèle. Ainsi, une expérience de modélisation basée sur la méthodologie décrite par Birgand et al. (2010) permettra d'étudier l'impact de la fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrate sur les estimations du REHe. L'objectif est d'identifier la fréquence d'échantillonnage limite à prendre en compte afin d'estimer les REHe avec une incertitude acceptable et bien définie.

Le couplage du modèle nitrate (NIT-DRAIN) avec un modèle de simulation de drainage agricole (ex. SIDRA-RU, (Henine et al., 2022)) permettra de s'affranchir des observations de débit parfois indisponibles ou peu accessibles. Ainsi, la disponibilité des données de concentration en nitrate et d'un couplage des schémas d'assimilation de données respectifs aux deux modèles (NIT-DRAIN et SIDRA-RU) peuvent suffire pour estimer rapidement et efficacement les paramètres d'entrée de ces modèles en plus de la variation du stock de nitrate dans le sol. Dès lors, nous essayerons de répondre à la question : peut-on estimer, d'une manière fiable, le reliquat entrée hiver en ayant à disposition peu de données de concentrations en nitrate et un modèle de drainage couplé « débit-nitrate » ?

## **Organisation du manuscrit de thèse**

---

Ce travail de thèse se décompose en trois grandes parties. La première partie, intitulée « Etat de l'art », reviendra sur les principales sources de la pollution azotée et les solutions mises en place

afin de réduire les fuites d'azote notamment la considération des outils de modélisation pour conceptualiser le transfert des polluants vers les milieux naturels.

La deuxième partie, intitulée « Développement et validation du modèle NIT-DRAIN », décrira les étapes de conception du modèle nitrate. Le chapitre II.1 reviendra tout d'abord sur les hypothèses ainsi que les points clés qui ont permis de mettre en place l'approche finale de modélisation. En effet, plusieurs approches conceptuelles de modélisation ont été développées puis testées en s'inspirant des travaux existants dans la littérature.

Le modèle « NIT-DRAIN » sera décrit dans le chapitre II.2. Il s'agit de la version finale adoptée et détaillée dans un article publié dans la revue « Agricultural Water Management ». Nous avons procédé à la validation du modèle en comparant les concentrations en nitrate simulées à ceux mesurées à l'exutoire d'un groupe de parcelles agricoles situé à Rampillon. Ce bassin versant agricole artificiellement drainé d'une superficie de 355 ha, localisé en région parisienne, en France, est caractérisé par un climat océanique tempéré.

Ensuite, la robustesse du modèle nitrate sera évaluée sur trois sites localisés dans deux contextes drainés différents en France (*Figure 1*) et présentant une hétérogénéité spatiale et pédoclimatique (chapitre II.3). Le but est d'étudier la variabilité spatiale des paramètres du modèle en procédant à des calages sous différentes configurations spatiotemporelles. Cette étude a fait l'objet d'une communication écrite dans un séminaire francophone (APL-REH).

La *Figure 1* décrit la structure projetée du modèle couplé « débit-nitrate ». Les trois sites d'études sont positionnés sur une carte de la France. La présence d'un gradient de superficie notable (1 ha, 35 ha, 355 ha) entre ces trois groupes de parcelle agricole procure davantage de fiabilité quant à l'étude de la robustesse du modèle NIT-DRAIN.

La troisième partie, intitulée « Assimilation de données variationnelle, application aux modèles de transfert de l'eau et de l'azote en contexte de drainage agricole », sera axée autour de l'implémentation de la méthode d'assimilation de données variationnelle sur les modèles SIDRA-RU et NIT-DRAIN dans le but d'améliorer l'estimation de leurs entrées respectives. Dans le chapitre III.1, nous procéderons, tout d'abord, à l'analyse de sensibilité par la méthode de l'adjoint afin d'identifier les paramètres d'entrée du modèle SIDRA-RU qui présentent le plus d'impact sur la performance de modélisation du débit de drainage. Ensuite, nous implémenterons l'assimilation de données variationnelle afin d'améliorer l'estimation des paramètres d'entrée du modèle (identifiés par la méthode d'analyse de sensibilité) et par conséquent les simulations du débit de drainage en se basant sur une nouvelle approche

combinée (variationnelle-bayésienne). Ce chapitre est présenté sous forme d'article, publié dans la revue « Journal of Hydrology ».

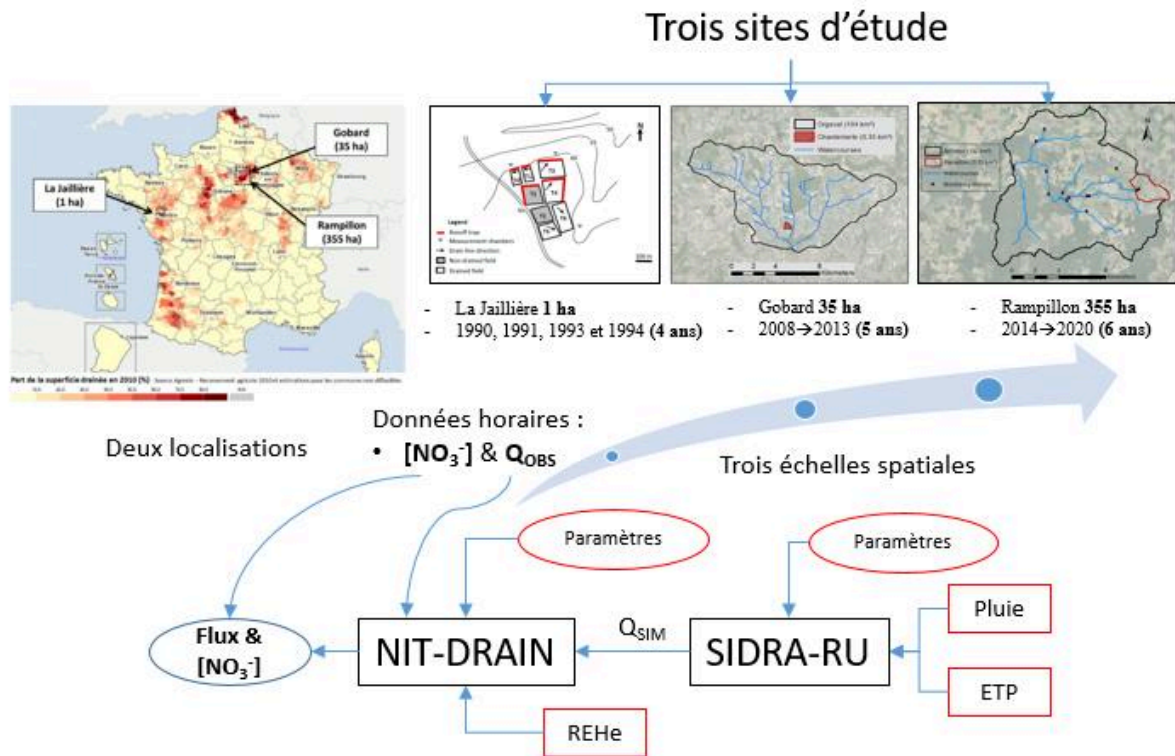


Figure 1: Schéma synthétisant les données à disposition, la localisation des sites d'étude ainsi que le lien existant entre les deux modèles exploités

Le chapitre III.2 s'intéresse à l'étude de l'influence de la fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrate sur la qualité des valeurs de reliquat entrée hiver estimés par le modèle NIT-DRAIN. Ce chapitre est rédigé sous forme d'article. Il sera publié dans une revue internationale à comité de lecture (ex. Agricultural Water Management).

En premier lieu, nous proposons de compléter les études de validation du modèle NIT-DRAIN présentées dans la première partie du manuscrit par une analyse de sensibilité. Le but est d'identifier les paramètres qui présentent le plus d'impact sur les simulations (sortie du modèle). Ensuite, l'assimilation de données variationnelle est implémentée au sein du modèle NIT-DRAIN afin de permettre une meilleure estimation de l'évolution temporelle du stock des nitrates dans le sol, notamment durant la période printanière où le stock d'azote potentiellement lixiviable est fortement impacté par l'apport des fertilisants.

Une discussion générale résumera les principaux résultats obtenus durant cette thèse. Egalement, les limites de notre approche de modélisation seront décrites ouvrant ainsi la porte à d'éventuelles perspectives.



## **Partie I - État de l'art**

---

Dans cette première partie du manuscrit de thèse, nous allons aborder les différents facteurs qui ont contribué à l'émergence et à l'intensification de la pollution azotée d'origine diffuse. Le fonctionnement du drainage artificiel des parcelles agricoles ainsi que le transfert de la pollution azotée en ce contexte particulier seront décrits. Nous présenterons également les solutions qui ont été déjà proposées afin de réduire l'exposition des parcelles agricoles au risque de la lixiviation des nitrates vers les milieux naturels.

Ensuite, nous mettrons en avant les différentes approches de modélisation et décrirons les principaux modèles de drainage agricole qui existent dans la littérature. Finalement, l'apport des méthodes d'assimilation de données dans un tel contexte sera exposé.

## Chapitre I.1 : La pollution azotée

---

Ce chapitre aborde les sources de la pollution diffuse de la ressource en eau. Nous mettons en avant les principales méthodes qui visent à améliorer la gestion des apports azotés afin de limiter les transferts de polluants vers les rivières et les nappes d'eau phréatiques.

### I.1.1 Contexte général

Les activités anthropiques liées aux récents développements technologiques ont eu des répercussions négatives sur l'environnement. L'impact observé sur la qualité de l'eau est loin d'être négligeable (Peters and Meybeck, 2000). En effet, cet impact s'est d'autant plus accentué suite à la démocratisation de l'agriculture intensive. Cette dernière vise la maximisation de la production agricole via (1) l'application d'importantes quantités d'intrants à base chimique (Muhammed et al., 2018) ; (2) l'expansion des superficies cultivées (remembrement agricole) en multipliant les activités de déforestation (Hunke et al., 2015) ou encore en drainant artificiellement des sols hydromorphes (Blann et al., 2009; Davidson, 2014). La pollution de l'eau d'origine diffuse est difficilement maitrisable à cause de l'hétérogénéité spatiotemporelle des pratiques agricoles à l'échelle d'un bassin versant. Le drainage agricole des sols hydromorphes par tuyaux enterrés figure parmi les avancées technologiques phares du dernier siècle. Si ces réseaux de drainage sont très répandus pour leur impact négatif sur le transfert des polluants (Skaggs et al., 1994), ils permettent de concentrer la pollution diffuse en un seul point de sortie « l'exutoire du réseau de drainage ». La construction des zones humides artificielles (ZTHA) en aval des parcelles agricoles artificiellement drainées (Tournebize et al., 2012) favorise l'atténuation de la pollution de l'eau en augmentant son temps de résidence (Tournebize et al., 2013; Tournebize et al., 2015). Ces retenues d'eau permettent la création d'un milieu propice au développement d'une riche biodiversité (Letournel et al., 2021). Les méthodes regroupant les meilleures pratiques de gestion (*Best Management practices BMPs* en anglais) se sont avérées comme étant des solutions durables et efficaces pour réduire le transfert des polluants vers les milieux naturels (Chen et al., 2001; Ruidisch et al., 2013; Haas et al., 2017). Il est à noter qu'une période de latence supérieure à dix ans pourrait être nécessaires pour détecter les premiers effets positifs liés à l'application de ces méthodes de gestion (Meals et al., 2010). De plus, un ensemble de facteurs peuvent freiner l'adoption massive des BMPs par les agriculteurs (Liu et al., 2018). Ainsi, des moyens humains et financiers doivent être mis en place pour sensibiliser les agriculteurs aux bénéfices de telles pratiques. Dans tous les cas, il est recommandé d'agir en amont de la chaîne, en optimisant et en fractionnant les quantités d'intrants (Zeng et al., 2013). En complément, l'implémentation des cultures intermédiaires

pièges à nitrate (CIPAN) permet de capturer le surplus d'azote présent dans le sol durant l'automne, limitant ainsi sa lixiviation en profondeur avec l'arrivée des premières pluies hivernales (Justes et al., 2012; Meyer et al., 2018). Billen et al. (2013) ont déterminé une relation empirique entre le surplus azoté et la lixiviation en dessous de la zone racinaire pour différents types de sols confirmant ainsi le rôle prépondérant que joue les CIPAN dans la réduction des fuites d'azote en profondeur.

### **I.1.2 Le cycle d'azote : quand les apports anthropiques deviennent prépondérants**

Le cycle de l'azote a connu trois régimes correspondants à trois grandes périodes qui se sont succédé sur la planète terre. La première période est connue par l'arrivée de l'oxygène dans l'atmosphère. Cette transformation radicale a permis la mise en place d'un cycle simplifié de l'azote basé sur un équilibre entre la fixation autotrophe de l'ammoniac et la reminéralisation hétérotrophe de l'azote organique.

La deuxième période est synonyme d'une rareté structurante de l'azote réactif. En effet, l'azote sous sa forme gazeuse stable et inerte (diazote) est difficilement mobilisable par la matière vivante. Ceci est traduit par un cycle fermé de l'azote avec une faible concentration d'azote minéral lessivé qui peut être facilement compensée par la fixation biologique du diazote. Le développement des pratiques agricoles devient alors une nécessité afin de faire face au manque d'azote réactif dans le sol. Le remplacement de la jachère par des légumineuses fixatrices d'azote augmentera la quantité d'azote réactif disponible dans le sol. Le nombre de bétail lui aussi est multiplié, ce qui permet une meilleure fertilisation des terres. L'explosion démographique, synonyme d'augmentation des besoins en alimentation des hommes, a fini par rendre ces méthodes inefficaces et limitées.

La troisième période correspond à une surabondance néfaste de l'azote réactif. En 1910, Fritz Bosch a développé un procédé qui permet la fixation industrielle de l'azote (Smil, 2004). En effet, l'azote atmosphérique (chimiquement inerte) sous haute pression et température est converti en azote réactif utilisable par les plantes et les animaux. Cette découverte a transformé de manière radicale les pratiques agricoles traditionnelles. Ces dernières ont été remplacées par une application importante d'engrais azoté synthétique sur les parcelles agricoles. Cette pratique est justifiée par la nécessité d'approvisionner une population avec des besoins en nourriture en hausse.

En effet, plusieurs études confirment la nécessité d'augmenter les apports azotés d'origine anthropique (azote réactif) afin de subvenir aux besoins alimentaires croissants de la population

mondiale (Smil, 1991; Zhu et al., 2005; Xiong et al., 2008). Cela correspond en grande partie à un apport diffus (Figure 2) et prononcé des engrais azotés synthétiques à l'échelle de la parcelle agricole ce qui a tendance à perturber le cycle naturel de l'azote.

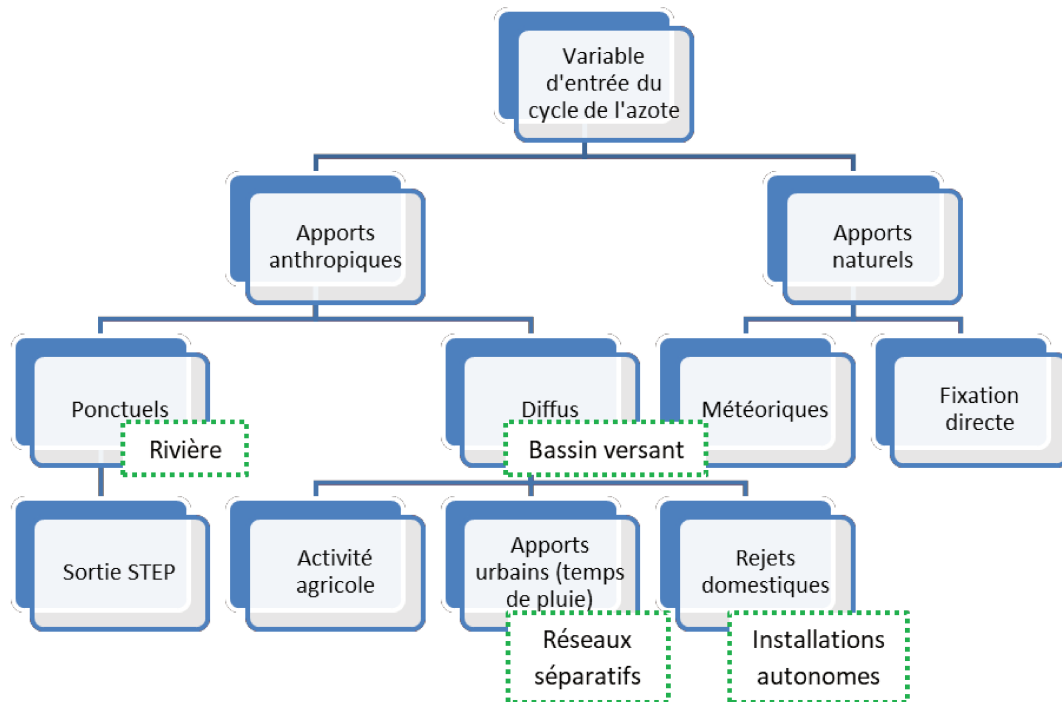


Figure 2: Origines des apports en azote réactif. D'après Payraudeau (2002)

La perte de la biodiversité, l'augmentation du phénomène d'eutrophisation et la contamination des ressources en eau destinées à la consommation en sont les conséquences (Billen et al., 2013). Il faut donc penser à modifier les pratiques culturelles afin de réduire la contamination des eaux par les nitrates et ainsi atteindre un équilibre entre le développement de l'agriculture et la préservation de l'environnement.

### I.1.3 Réduire la pollution azotée : contexte réglementaire

La pollution diffuse des eaux douces par les nitrates fait partie des préoccupations majeures des différents acteurs et gestionnaires des ressources en eau. À l'échelle européenne, un programme d'actions a été mis en place dans le cadre de la directive Nitrates (Directive, 1991) afin de réduire les fuites d'azote d'origine agricole vers l'environnement. Ce dernier fixe le seuil maximal de concentration en nitrates à 50 mg  $\text{NO}_3^-/\text{l}$  pour encadrer et adapter les pratiques agricoles dans le but d'atteindre le bon état des eaux.

Une déclinaison nationale (*Programme d'actions national, PAN*) et régionale (*programmes d'actions régionaux, PAR*) de la directive Nitrates fut créée en France précisant, ainsi, les mesures d'application complémentaires via des textes réglementaires dans le but d'atteindre les

objectifs de qualité des eaux cités par la directive Nitrates (DN). De manière similaire, c'est le programme de gestion durable de l'azote (PGDA) qui a été mis en place au sein de la région de la Wallonie (Belgique) pour répondre aux objectifs de la DN et protéger les eaux naturelles de la pollution d'origine agricole (Vandenberghe et al., 2011).

#### I.1.4 La gestion maîtrisée des apports azotés

De nos jours, les pratiques de fertilisation sont considérées comme un élément clé permettant d'assurer un rendement agricole optimal et couvrir ainsi la demande croissante des populations en terme de besoin alimentaire (Leghari et al., 2016). Dès lors, une gestion maîtrisée des apports azotés en milieu agricole est primordiale afin de limiter de potentiels surdosages se traduisant généralement par une augmentation significative des exportations de nitrates vers les milieux naturels (Agrawal et al., 1999; Zhou and Butterbach-Bahl, 2014).

La quantité d'azote nitrique présente dans le sol varie suivant la profondeur. En effet, la partie profonde du sol contient généralement la plus grande fraction d'azote nitrique prête à être lixiviée. Cela est dû à la capacité d'absorption racinaire limitée de la culture en place (Kuhlmann et al., 1989). Réduire les fuites en profondeur de l'azote nitrique revient donc à mieux gérer le stock disponible d'azote en optimisant les apports d'engrais azotés d'une manière à trouver un équilibre entre l'apport en lui-même, le rendement agricole et la couverture du besoin alimentaire de la population (Figure 3).

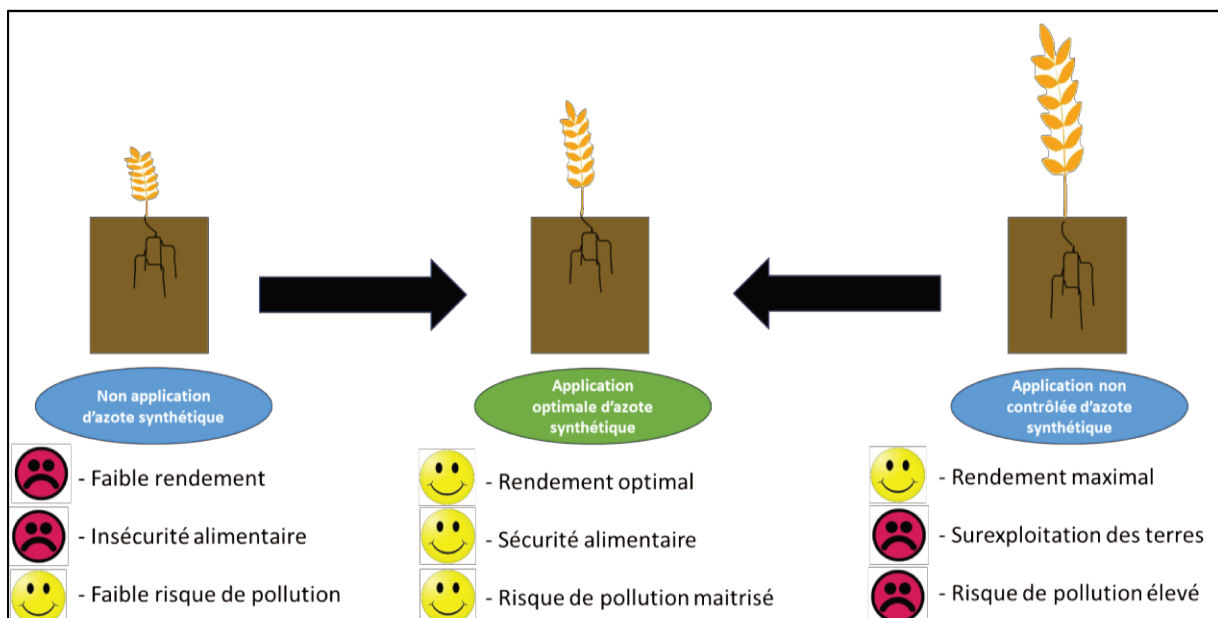


Figure 3: Schéma illustrant la nécessité de trouver un équilibre entre apport azoté, besoin alimentaire et rendement agricole

Parmi les méthodes utilisées pour apporter des engrais azotés, nous pouvons noter le schéma classique qui consiste à diffuser les fertilisants d'une manière régulière sur l'ensemble de la parcelle agricole. Cette méthode apporte un gain de temps considérable aux agriculteurs mais présente, en contrepartie, un risque élevé de fuite du surplus d'azote. Il serait donc préférable d'ajuster et de fractionner dans le temps la quantité totale de fertilisants afin de limiter les pertes d'azote par lixiviation (Zeng et al., 2013). Afin de limiter les doses appliquées, un autre moyen consiste à placer l'engrais à des endroits stratégiques en même temps que le semis (Nkebiwe et al., 2016). Egalement, nous pouvons citer la fertigation, une technique rendue possible avec le développement de l'irrigation dite économique de type goutte à goutte. La fertigation combine irrigation et fertilisation (Hagin and Lowengart, 1996; Bar-Yosef, 1999). Elle permet d'apporter les quantités nécessaires d'azote sous forme liquide mélangé avec l'eau d'irrigation. D'une manière générale, les pratiques agricoles ne doivent pas se limiter au seul apport des fertilisants synthétiques. Par ailleurs, cultiver des légumineuses en interculture permet la fixation symbiotique de l'azote (Mylona et al., 1995). Ce type de culture s'avère très efficace pour enrichir le sol en azote et limiter ainsi les besoins azotés des cultures suivantes (Bado, 2002). En effet, il a été prouvé par Lassaletta et al. (2014) que la fixation symbiotique de l'azote via l'introduction des CIPAN (ex. légumineuses) améliore l'efficacité des apports. D'autres techniques encore plus innovantes indiquent la possibilité d'améliorer l'assimilation des nitrates par les plantes en tirant profit de leur génétique (Hirel et al., 2007). Indépendamment de la technique adoptée pour introduire l'engrais azoté à l'échelle de la parcelle agricole, la quantité d'intrant doit toujours compléter le stock d'azote déjà disponible dans le sol à faible profondeur et facilement utilisable par la plante.

### **I.1.5 La mesure des reliquats azotés, intérêt et attentes**

La distribution du stock d'azote minéral dans le sol peut présenter d'importantes variabilités spatiotemporelles en fonction de la rotation culturale en place, la teneur en eau et la texture du sol (Stenger et al., 1998; Jarvis, 1999). Dès lors, il est très important d'analyser régulièrement la quantité des nitrates piégée dans le sol (à faible profondeur) afin d'adapter au mieux les pratiques agricoles et de limiter, ainsi, les pertes azotées par lixiviation. De ce fait, la quantification des reliquats sortie hiver et post récolte (RSH et RPR, respectivement) à l'échelle de la parcelle permet l'ajustement et l'optimisation des apports azotés. En France, c'est la méthode du bilan prévisionnel qui est appliquée afin d'estimer les doses de fertilisants à apporter suivant la culture en place et le type de sol (Comifer, 2011). L'analyse du RSH est très répandue dans le domaine de l'agriculture vu son intérêt fortement économique. A l'inverse, le

reliquat entrée hiver (REH) constitue un indicateur dont la dimension est plutôt environnementale. En effet, la mesure du REH permet la quantification de l'azote potentiellement lixiviable (APL) en début de saison de drainage (idéalement avant l'arrivée des premières pluies hivernales). Ce stock d'azote minéral se forme essentiellement à partir d'un surplus azoté engendré par une gestion déséquilibrée de la fertilisation printanière ainsi qu'une forte minéralisation du sol lorsque les températures deviennent élevées (Miller and Geisseler, 2018).

L'analyse des REH d'une parcelle agricole s'effectue en automne (octobre-décembre). Ainsi, des campagnes d'échantillonnage du sol à la tarière, sur trois tranches de profondeur du sol (0-30 cm, 30-60 cm et 60-90 cm), sont effectuées tout en s'assurant que l'étendue spatiale des prélèvements soit représentative. Dans la littérature, des REH « références » ont été établies en se basant sur huit classes de culture dans le but d'encadrer l'utilisation de l'azote par les agriculteurs (Vandenbergh et al., 2013). L'étude montre que la valeur du REH peut varier entre 10 et 110 kgN.ha<sup>-1</sup>.an<sup>-1</sup> en fonction du type de culture en place. Néanmoins, très peu d'études s'intéressent à la considération du REH comme un indicateur de pression azotée pour mieux maîtriser la lixiviation azotée durant la période des fortes précipitations et en contexte de changements globaux (Blondel, 2008), même si des progrès sont notés à l'échelle du gouvernement ces dernières années (CGEDD, 2020).

#### **I.1.6 La lixiviation des nitrates**

La lixiviation verticale des nitrates se produit lorsque l'excédent est transporté par l'eau de drainage (artificiel ou naturel) vers les cours d'eau et nappes souterraines en période hivernale. Cette voie de pollution est en partie responsable de la dégradation rapide de la ressource en eau (Agrawal et al., 1999; Kumazawa, 2002; Almasri and Kaluarachchi, 2004). Le risque de lixiviation devient important lorsque la disponibilité des nitrates dans le sol est supérieure aux besoins réels des cultures. Plusieurs études scientifiques ont alerté sur les risques environnementaux liés à l'augmentation de la lixiviation des nitrates depuis la démocratisation des engrais azotés de synthèse (Di and Cameron, 2002). Si aujourd'hui l'application de l'engrais azoté est encadrée par la réglementation, la tendance globale quant aux quantités appliquées demeure en constante augmentation (Lu and Tian, 2017). De même, l'estimation des quantités d'azote lixiviées en profondeur ou latéralement vers les cours d'eau naturels reste entachée d'incertitudes (Thorsen et al., 2001; de Vries et al., 2003; Kroeze et al., 2003).

### **I.1.7 Fonctionnement du drainage agricole**

La présence d'un substratum imperméable formé par une couche de sol à forte teneur en argile et à faible profondeur réduit l'infiltration verticale de l'eau par effet de gravité. Généralement, cela se traduit par l'apparition d'une nappe d'eau superficielle permanente ou temporaire. Le drainage agricole consiste à installer un système de tuyaux perforés à faible profondeur du sol ou encore des fossés à surface libre dans le but d'évacuer l'excès d'eau dans le sol des parcelles agricoles pour assurer un meilleur développement des cultures. Un sol drainé de manière gravitaire reprend le fonctionnement physique d'une éponge (Richardson and Siccama, 2000). En effet, l'arrivée des premières pluies hivernales remplissent d'eau les porosités du sol jusqu'à saturation. Le surplus d'eau dans le sol commence à s'écouler d'une manière gravitaire vers les drains. L'arrêt de la pluie fait que la vitesse d'écoulement diminue graduellement. Cette dernière phase est appelée « tarissement ». L'année hydrologique en contexte de drainage agricole pourrait se décomposer en trois saisons distinctes : une saison d'amorce de drainage qui se caractérise par une saturation progressive du sol et l'absence d'écoulement dans les drains. Puis, suivie par une saison de drainage intense (SDI) qui est marquée par une évacuation rapide et continue de l'eau par les drains. Ensuite par une saison de tarissement notée par une diminution progressive et continu de la vitesse d'écoulement d'eau dans les drains (Lesaffre, 1988).

En France, la surface agricole utile (SAU) représente plus de la moitié du territoire national français ( $\approx 29$  Mha). Plus de 10% de ces sols agricoles sont artificiellement drainés par des tuyaux enterrés ou des fossés à ciel ouvert (Vincent, 2020). La configuration moyenne d'un système de drainage agricole (ex. diamètre et profondeur des drains, écartement) doit permettre l'évacuation d'une pluie de période de retour d'un ou deux ans. Le dimensionnement et le fonctionnement hydrologique des réseaux de drainage agricole dépend fortement des variables climatiques (pluie, évapotranspiration, température...), des paramètres du sol (perméabilité, porosité, texture...) et de la réserve utile du sol (RU). Le réseau de drainage est en général dimensionné pour limiter au maximum sa mise en charge (Henine et al., 2012) et ainsi permettre un rabattement permanent de la nappe à l'interdrain équivalent à une profondeur de 20 à 30 cm (Arlot, 1999), sur une période moyenne de 3 jours (Vincent, 2020). La présence du drainage permet une meilleure exploitation de ces terres. Cela facilite l'accès aux champs et améliore les rendements agricoles (Mohtadullah, 1990). En effet, l'évacuation rapide de l'eau excédentaire par le système de drainage favorise l'aération du sol permettant, ainsi, un meilleur développement racinaire (Figure 4).



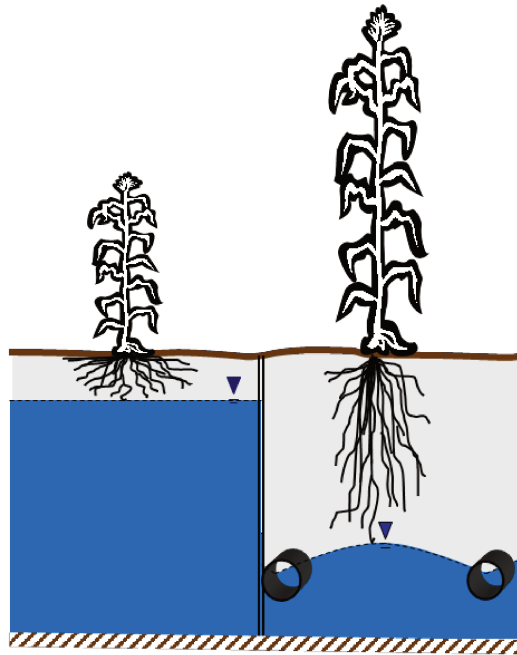


Figure 4: Fonctionnement du drainage agricole. A gauche, absence du drainage. A droite, meilleur développement de la culture dû à la présence du drainage

### I.1.8 La pollution azotée en contexte de drainage agricole

Au-delà des objectifs purement économiques (ex. améliorer les rendements) et ergonomiques (ex. faciliter l'accès aux champs), les stratégies de dimensionnement et de mise en place des réseaux de drainage agricole doivent prendre en considération la dimension environnementale en limitant par exemple les exportations de polluants vers les cours d'eau et nappes souterraines. En effet, le drainage agricole a été longuement considéré dans de nombreuses études comme un acteur responsable de la lixiviation des nitrates vers les milieux naturels (Skaggs et al., 1994). Selon Arlot (1999) c'est plutôt la dynamique des concentrations de polluants (ex. nitrates, pesticides) qui peut être fortement modifiée en présence du drainage agricole sans que cela impacte les flux totaux exportés.

Le drainage agricole peut, également, jouer le rôle d'un témoin de la pollution d'origine diffuse (Arlot, 1999). En effet, l'instrumentation des parcelles agricoles avec l'installation des stations de mesure de la quantité et de la qualité de l'eau à l'exutoire des systèmes de drainage, permet d'avoir un meilleur suivi des exportations de polluants vers les milieux naturels. A ce jour, plusieurs solutions existent pour limiter les pertes de polluants par lixiviation en parcelles drainées (Randall and Goss, 2008).

Pour limiter l'impact du transfert des nitrates vers les milieux naturels, plusieurs stratégies peuvent être envisagées. Nous pouvons citer la technique du drainage contrôlé (Dinnes et al.,

2002) qui consiste à maintenir la nappe superficielle à des niveaux stratégiques afin d'augmenter le temps de séjour de l'eau et des polluants, favorisant la dénitrification et réduisant ainsi le risque de lixiviation rapide en dehors des parcelles drainées. Cependant, cette technique ne s'applique qu'en terrain plat. D'autres solutions semi-curatives comme par exemple l'installation des zones tampon humide artificielles (ZTHA) en aval des réseaux de drainage agricole permettent de traiter naturellement l'eau de drainage, généralement chargée en polluants (Tournebize et al., 2012; Tournebize et al., 2013; Tournebize et al., 2015).

Cependant, la complexité des mécanismes de transfert et d'exportation des polluants depuis les parcelles agricoles drainées constitue le principal frein quant à l'adoption et à la mise en œuvre d'une stratégie environnementale efficace et résiliente.

## Chapitre I.2 : Modélisation des transferts

---

Dans ce chapitre, les approches de modélisation des transferts de l'eau et des polluants seront présentées puis un bilan primaire regroupant les principaux modèles de qualité de l'eau sera dressé. Finalement, les techniques d'assimilation de données (AD) seront citées et comparées aux méthodes classiques de calage des paramètres d'entrée des modèles.

### I.2.1 Approches de modélisation

Un modèle validé permet de simplifier un système réel souvent complexe, faisant intervenir plusieurs processus de transformation et de transfert de l'eau et des polluants à une échelle spatiotemporelle donnée. Cette simplification implique généralement la considération d'un certain nombre d'hypothèses et limites de fonctionnement. On peut classer les approches de modélisation du transfert de l'eau et des polluants suivant leur représentation du temps et de l'espace (Payraudeau, 2002; Jajarmizadeh et al., 2012).

En effet, la variable temps a toute son importance dans la modélisation des processus de transfert à une échelle spatiale donnée. La dynamique des concentrations de polluants pourrait être décrite en utilisant des modèles intégrant de très faibles pas de temps de simulation (ex. minutes, heures, jours). A l'inverse, les modèles intégrant des pas de temps importants (ex. mensuels, trimestriels, annuels) sont plutôt destinés à décrire la dynamique saisonnière des polluants.

Un modèle peut être global, distribué ou semi-distribué, conceptuel ou à base physique. Un modèle est dit global s'il implique un raisonnement à une échelle spatiale unique, sans tenir compte des variations spatiales de ses paramètres. Ainsi, les hétérogénéités existantes à des échelles spatiales plus petites (ex. occupation du sol, humidité du sol, texture du sol) sont amenées à être moyennées sur l'ensemble de la zone modélisée (ex. bassin versant, groupe de parcelles agricoles). Les paramètres d'entrée de ce type de modèle sont représentatifs de l'ensemble du système et manquent souvent de sens physique. Dès lors, un calage de ces derniers devient nécessaire afin d'ajuster les simulations sur les mesures octroyées à l'exutoire de la zone étudiée.

De même, les modèles peuvent être complètement distribués en considérant une discrétisation unitaire et géolocalisé de l'espace. L'évolution spatiotemporelle du processus d'étude pourrait être simulée à l'échelle d'une maille élémentaire (unité spatiale), en imposant une condition initiale et des conditions aux limites. L'une des grandes limites de cette approche est le nombre important de paramètres à estimer. Des structures de modèles semi-distribués, se situant entre

les modèles globaux et distribués, sont généralement plus facile à paramétrer que les modèles distribués (Tang et al., 2019). Ce type d'approche regroupe un ensemble d'entités spatiales connectées à l'aide des fonctions de routage. Le calage des paramètres s'effectue généralement à l'échelle de ces entités proposant ainsi des points supplémentaires pour comparer les simulations aux observations quand elles existent.

Finalement, la structure d'un modèle peut s'appuyer sur une résolution d'un ensemble d'équations mathématiques à base physique. L'utilisation d'une approche à base physique en hydrologie doit être remise en question dès lors que l'on observe une auto-compensation des paramètres (équifinalité) avec des valeurs irréalistes limitant ainsi leur sens physique (Beven, 1989). A l'inverse, une approche de modélisation simplifiée se basant sur la conceptualisation des mécanismes de transfert de l'eau et des polluants est intéressante si l'objectif recherché est d'obtenir des sorties de modèle (simulations) de qualité sans avoir à intégrer la complexité de ces processus de transfert.

Il est à noter que les mécanismes de transfert de l'eau et des polluants dans le sol doivent être pris en considération lorsque l'hydraulique du bassin versant est significativement impactée par la présence d'un système de drainage artificiel. La présence des drains enterrés dans les sols constitue une voie de transfert rapide de l'eau et des polluants d'origine agricole vers les cours d'eau. Dans ce contexte, l'intégration des réseaux de drainage ou l'utilisation du concept de la double perméabilité du sol par les modèles hydrologiques/hydrauliques prend tout son sens.

### **I.2.2 Modélisation de la double perméabilité du sol en présence du drainage**

Le chemin naturel de l'eau et des polluants dans le sol est fortement modifié en présence du drainage agricole. De nombreux travaux mettent en évidence deux processus majeurs de transfert (rapide et lent) des polluants en parcelle drainée (Gramlich et al., 2018; Willkommen et al., 2019; Kobiarska et al., 2020). Ces deux types d'écoulement peuvent être distingués au sein de la partie du sol située entre le drain et l'interdrain. Généralement, la partie du sol située au-dessus des drains est faiblement saturée par l'eau ce qui favorise la formation des macropores (racines, ver de terre, fracture du sol). Cela donne naissance à des écoulements préférentiels rapides des solutés vers les drains (Kjær et al., 2011). A l'inverse, les solutés s'infiltrant à proximité de l'interdrain présentent un chemin d'écoulement plus long et un transfert plus lent. En effet, le transfert vertical de l'eau et des polluants, à partir de la surface du sol, se transforme progressivement en un transfert horizontal lent en direction du drain à cause de la présence d'une couche imperméable du sol en dessous du drain (Paris, 2004). Dès

lors, il devient intéressant de considérer le gradient des vitesses de transfert des solutés dans un sol agricole artificiellement drainé. Cela a été confirmé par Paris (2004) suite à son expérience de modélisation de la trajectoire d'un soluté apporté au niveau de la surface d'un sol drainé (Figure 5). De plus, plusieurs travaux ont mis en avant l'importance de considérer les deux types d'écoulement via l'approche à double perméabilité (Gerke and van Genuchten, 1993; Gerke and Köhne, 2004; Frey et al., 2016). L'approche de modélisation décrite par Branger et al. (2009) se base sur la conceptualisation des transferts de pesticides en milieu agricole artificiellement drainé. Ainsi, la décomposition de l'espace « drain-interdrain » en deux compartiments permet de prendre en compte les deux voies (rapide et lente) de transfert des pesticides.

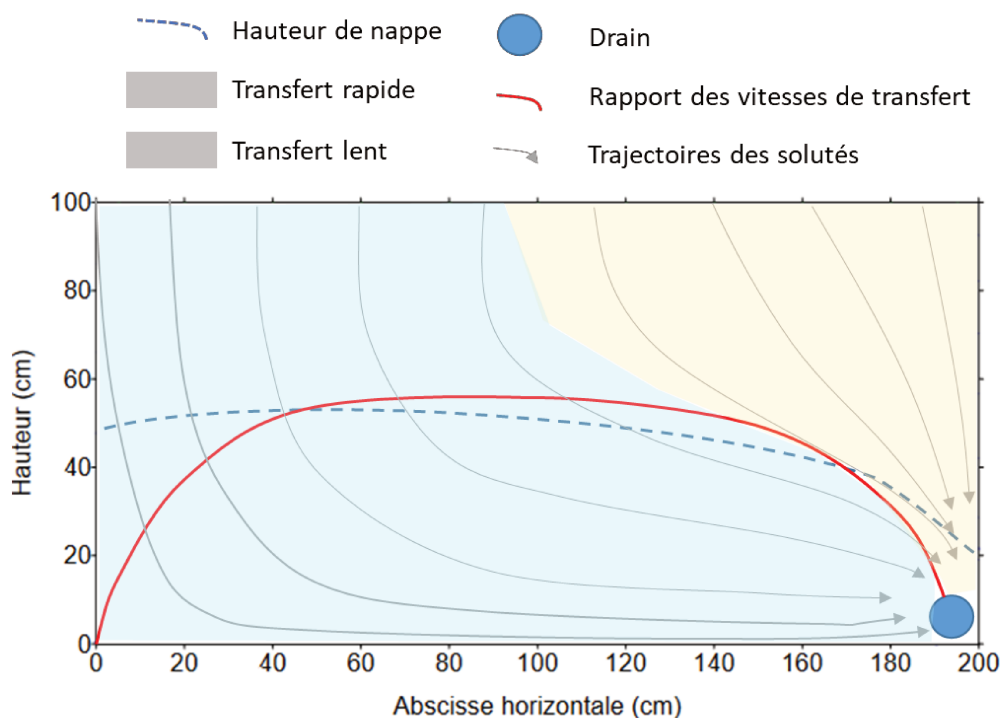


Figure 5: Schématisation du mouvement d'un soluté dans l'espace "drain-interdrain". La courbe rouge indique la neutralité du rapport des vitesses de transfert (horizontal/vertical) ; au-dessus/au-dessous de cette courbe la composante verticale/horizontale de la vitesse est dominante. Adapté de Paris (2004)

### I.2.3 Les modèles de drainage agricole

Dans la littérature, nous retrouvons un ensemble de modèles numériques intégrant le principe de fonctionnement du drainage agricole afin de mieux caractériser le transfert de l'eau et des polluants dans les bassins versants drainés. Ces modèles permettent de simuler plusieurs variables de sortie, notamment le débit, la hauteur d'eau et le flux des polluants (ex. nitrates, pesticides) à l'exutoire d'un réseau de drainage agricole et nécessitent l'acquisition et la

connaissance d'un certain nombre de données d'entrée (ex. variables de forçage climatique, variables et paramètres d'entrée).

L'objectif de la modélisation en contexte de drainage agricole dépend des besoins de l'utilisateur final. Des modèles globaux ou à base physique ont été spécialement développés pour simuler l'écoulement d'eau dans un sol artificiellement drainé comme DRAINMOD (Skaggs et al., 2012), EnDrain (Valipour, 2012; Oosterbaan, 2019), SIDRA (Zimmer, 1988) ou CSUID (Alzraiee et al., 2013). Ces modèles peuvent, aussi, être utilisés pour des fins de dimensionnement des réseaux de drainage (calcul de l'écartement et la profondeur des drains). Parmi les modèles à base physique, nous pouvons citer HYDRUS-2D (Simunek et al., 1999; Radcliffe and Simunek, 2018). Ce modèle simule l'écoulement de l'eau et des solutés, en régime permanent ou transitoire, en résolvant les équations de Richards. Il peut être utilisé, par exemple, pour simuler la lixiviation du nitrate (Tao et al., 2021) et la salinisation du sol (Liu et al., 2021) sous impact du drainage agricole.

Plusieurs modèles, développés à la base pour décrire l'hydrologie d'un bassin versant, intègrent la fonction du drainage agricole pour simuler le flux d'eau, des pesticides et des nutriments évacués par le réseau de drainage. Nous pouvons citer HYPE (Arheimer. and al, 2010) qui a été calibré et validé sur un bassin versant de 100 km<sup>2</sup> à fort caractère agricole situé en Allemagne (Jomaa et al., 2016), SWAT (G. Arnold et al., 2012) et ADAPT (Gowda et al., 2012).

Un module de drainage pourrait également être intégré aux modèles agronomiques afin de prendre en considération le fonctionnement hydraulique spécifique aux sols artificiellement drainés. Ce type de couplage existe déjà dans le modèle STICS (Tournebize et al., 2004). Ce modèle, développé à l'INRAE (précédemment INRA) en collaboration avec les différents acteurs du milieu agronomique (Brisson et al., 2003), permet de simuler le cycle agronomique des cultures ainsi que leur bilan hydrique. Il requière en entrée des données climatiques, de sol et de pratiques agricoles pour en simuler des grandeurs agronomiques et environnementales en sortie comme par exemple le rendement et la quantité lixiviée d'azote.

Des modèles biogéochimiques simplifiés ou caractérisant le transfert des pesticides prenant en compte l'impact du drainage agricole existent également. Nous pouvons noter le modèle conceptuel PESTDRAIN (Branger et al., 2009) qui a été développé spécifiquement pour simuler les exportations de pesticides des parcelles drainées. Par ailleurs, le modèle développé par Matinzadeh (2017) pour simuler la lixiviation du nitrate des parcelles agricoles drainées

prend en compte les processus importants de transformation et de transfert d'azote réactif dans le sol. Ce dernier décompose le sol en deux zones (saturée et non saturée) pour décrire correctement les processus hydrologiques associés. Si les résultats de simulation sont fiables, l'octroi d'un grand nombre de données s'avère nécessaire pour faire fonctionner ce modèle.

Gurovich and Oyarce (2015) énumèrent une large liste (non exhaustive) des modèles développés pour simuler l'hydrologie et la qualité de l'eau en sortie des parcelles agricoles artificiellement drainés. Cette liste de modèle pourrait être complétée, sans que cela soit encore exhaustif, par ceux cités par Henine et al. (2022), Chelil et al. (2022a) et Chelil et al. (2022c).

La performance d'un modèle repose à la fois sur (1) la qualité des données observées qui sont confrontées aux simulations, (2) la structure du modèle, (3) la stratégie d'optimisation des paramètres d'entrée et (4) la qualité des données de forçage climatique et des variables d'état (Refsgaard and Storm, 1996). La présence d'un grand nombre de paramètres peut affecter négativement la performance d'un modèle notamment lorsqu'un paramètre est mal défini et/ou accompagné par un sens physique faible ou inexistant. En effet, il a été démontré par Perrin et al. (2001) que les modèles nécessitant un grand nombre de paramètres sont généralement moins performants et moins consistants pendant l'étape de validation.

Un ensemble d'indicateurs statistiques existe pour évaluer la performance d'un modèle de qualité de l'eau. Nous pouvons noter les critères NSE (Nash and Sutcliffe, 1970) et KGE (Gupta et al., 2009), très fréquemment utilisés pour évaluer les modèles hydrologiques. Ainsi, des valeurs de NSE, KGE proches de l'unité caractérisent un écart très réduit entre les simulations et les observations. Des algorithmes d'optimisation basés sur la modélisation inverse permettent la recherche automatique des solutions stables dans un ensemble des possibles bien défini. L'objectif est d'atteindre des performances élevées de modélisation tout en proposant des valeurs de paramètres stables et réalistes. Cependant, ces algorithmes de calage peuvent présenter quelques limites techniques à savoir la possibilité d'estimation d'un nombre réduit de paramètres d'entrée.

#### **I.2.4 L'analyse de sensibilité**

Les modèles cités ci-dessus peuvent intégrer des entrées dont les valeurs sont difficilement observables ce qui nécessite leur potentielle estimation. De plus, certains modèles ont tendance à être sur-paramétrés ce qui peut limiter l'efficacité des algorithmes d'optimisation et par conséquent, impacter la performance de modélisation. L'introduction d'une analyse de sensibilité permet de réduire le nombre de grandeurs (entrées d'un modèle) à estimer, rendant

le problème de modélisation possible à résoudre (Pianosi et al., 2016; Razavi et al., 2021). En effet, l'implémentation d'une analyse de sensibilité en amont d'une routine d'optimisation permet de présélectionner les entrées du modèle qui présentent le plus d'impact sur les sorties de ce dernier. Nous pouvons noter l'existence de plusieurs méthodes d'analyse de sensibilité dans la littérature. Sobol (Sobol, 1993; Zhang et al., 2015) figure parmi les méthodes d'analyse de sensibilité les plus populaires dans le domaine de la géoscience (Henine et al., 2022). Le principal avantage de cette méthode est son applicabilité universelle et cela peu importe la complexité de la structure du modèle puisque cette dernière n'intervient que sur les entrées et sorties du modèle qui sont le plus souvent accessibles. Cependant, la méthode de Sobol présente une limitation majeure, celle de la capacité de calcul (Iooss and Lemaître, 2015). De ce fait, le temps d'exécution dépend fortement du nombre de paramètres d'entrée à considérer. A l'inverse, les méthodes d'analyse de sensibilité basées sur l'adjoint (Allaire, 2015) sont plus adaptées aux modèles comprenant un nombre important de paramètres d'entrée ou en présence d'une distribution spatiotemporelle de ses derniers (Goutal et al., 2018). En effet, ce type d'approche permet de générer les sensibilités d'une manière précise en une seule exécution de modèle.

### **I.2.5 L'assimilation de données**

La forte adoption de l'assimilation de données dans le domaine de la géoscience (Ghil and Malanotte-Rizzoli, 1991; Reichle, 2008) témoigne de la puissance d'une telle technique dans l'estimation d'un grand nombre de données d'entrée et/ou de variable d'état (Bertino et al., 2003; Jean-Baptiste et al., 2011). Depuis, les méthodes d'assimilation de données se sont vu rapidement intégrées aux modèles de prévision hydrologiques (Liu et al., 2012) et de la qualité de l'eau (Cho et al., 2020).

Récemment, Cho et al. (2020) ont précisé que les principales méthodes d'assimilation de données appliquées aux modèles de qualité de l'eau sont (1) l'assimilation de données variationnelle qui peut être implémentée pour résoudre les problèmes fortement non linéaire, (2) le filtre de Kalman étendu qui permet une linéarisation locale des systèmes et (3) le filtre de Kalman d'ensemble qui est adapté principalement aux problèmes de très grande dimension. Malgré le fort potentiel que présente l'assimilation de données variationnelle dans la résolution avec précision des problèmes non linéaire de grande dimension, son application aux modèles de qualité de l'eau et particulièrement ceux prenant en considération le drainage agricole reste très limitée voire inexistante à ce jour.



Contrairement aux méthodes d'assimilation de données probabilistes telle que le filtre de Kalman d'ensemble (McLaughlin, 2002; Reichle et al., 2002) qui sont relativement simples à mettre en place, les méthodes variationnelles comme la 4D-Var (Rabier et al., 2000; Gauthier et al., 2007) nécessitent la génération du code adjoint au modèle direct. Une telle tâche peut rapidement devenir complexe et chronophage en fonction de la structure du modèle et de la différentiabilité des fonctions qui le composent. L'émergence des outils de différentiation automatique comme TAPENADE (Hascoet and Pascual, 2013), OpenAD/F (Utke et al., 2008) et CasADi (Andersson et al., 2012) ont permis de réduire drastiquement le temps nécessaire et le niveau de complexité pour obtenir le code adjoint. Dès lors, un ensemble d'études de modélisation ont vu le jour, mettant en avant l'avantage des techniques d'assimilation de données variationnelle dans l'amélioration des entrées et sorties des modèles hydrauliques et hydrologiques présentant une spatialisation des paramètres d'entrée (Oubanas et al., 2018a; Oubanas et al., 2018b; Jay-Allemand et al., 2020).

## Conclusion de la partie I

---

La forte croissance démographique que le monde a connue au XXe siècle s'est accompagnée d'un besoin de rendement agricole maximal. Atteindre des taux de rendement aussi élevés nécessite la mise en place d'une agriculture intensive caractérisée par une utilisation importante des fertilisants synthétiques. Dès lors, une gestion non maîtrisée des apports peut rapidement se transformer en une disponibilité excédentaire du nitrate au sein des couches peu profondes du sol. Ainsi, les hydrosystèmes proches de ces parcelles agricoles se retrouvent vulnérables face à ce surplus azoté potentiellement lixiviable avec l'arrivée des premières pluies hivernales et en absence d'un couvert végétal approprié (type CIPAN).

Diverses pratiques agricoles favorisant une gestion maîtrisée du stock d'azote dans le sol ont été susmentionnées. Ces dernières visent à maintenir une quantité de nitrate optimale dans le sol tout au long de la saison agricole afin de réduire les fuites d'azote en profondeur. La mise en place efficace de ces pratiques nécessite la connaissance du stock de nitrate piégé dans le sol à différentes périodes de la saison. Les RSH (reliquat sortie hiver) et RPR (reliquat post-récolte) sont mesurées ponctuellement à l'échelle de la parcelle agricole et permettent d'estimer la quantité d'azote minéral présente dans le sol à l'ouverture et à la fermeture du bilan, respectivement. En complément, le REH (reliquat entrée hiver) permet de quantifier le risque de lixiviation des nitrates durant la période hivernale et apporte, donc, une information d'ordre environnementale. Cependant, ces mesures restent ponctuelles, entachées d'incertitude et onéreuses. C'est dans ce contexte précis que la modélisation du transfert des nitrates dans les sols prend toute sa place.

Les rares modèles qui proposent un suivi continu de la quantité des nitrates dans le sol (ex., STICS, LIXIM) prennent en considération l'axe agronomique qui inclut les principales transformations biogéochimiques constituant le cycle complexe d'azote. Il serait pertinent de développer un modèle nitrate simple et robuste permettant d'estimer, d'une manière fiable, l'évolution temporelle du stock d'azote minéral dans le sol à partir des données de débit et de concentration en nitrate. Cela pourrait être envisageable en complétant le fonctionnement classique d'un modèle conceptuel de transfert des nitrates par l'implémentation d'un algorithme d'assimilation de données variationnelle capable d'estimer, avec le minimum d'incertitude, la variation temporelle de la quantité de nitrate dans le sol.

Une grande partie de l'eau et des polluants qui sont transférées par les porosités d'un sol agricole artificiellement drainé sont mesurables à l'exutoire du bassin versant considéré. Cela

suppose que la mesure du débit et l'assimilation variationnelle des données de concentration en nitrate à l'exutoire du système de drainage peuvent suffire pour décrire l'évolution de la quantité de nitrate dans le sol.

## **Partie II - Développement et validation du modèle NIT-DRAIN**

---

Cette deuxième partie du manuscrit est dédiée à la description du modèle de transfert des nitrates dans les sols des parcelles agricoles artificiellement drainées. En effet, l'idée de base provient du besoin réel d'un modèle, simple et nécessitant peu de données d'entrée, permettant à la fois de prédire des concentrations en nitrate fiables mais aussi d'estimer les valeurs annuelles de reliquat entrée hiver en contexte de drainage agricole.

Les trois chapitres qui composent cette partie du manuscrit présentent le développement et la validation du modèle NIT-DRAIN puis l'étude de sa robustesse en se basant sur des données de terrain provenant de trois bassins versants agricoles artificiellement drainées situés en France et présentant différentes configurations spatiales et climatiques.

Le modèle conceptuel NIT-DRAIN est construit à partir des travaux de thèse d'Arlot (1999). Ce modèle décrit les deux modes contrastés de transfert des nitrates en parcelles agricoles artificiellement drainées. Ainsi, nous nous sommes basés sur les équations de transfert (1) exponentielle décrite par Magesan et al. (1994) puis appliquée par Arlot (1999) et (2) de Burns (1975) pour simuler, respectivement, les écoulements lents résiduels et les écoulements préférentiels rapides dans la partie du sol située entre le drain et l'interdrain.

## Chapitre II.1 : Genèse du modèle nitrate « NIT-DRAIN »

### II.1.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation des différentes étapes de construction du modèle de transfert des nitrates en milieu agricole artificiellement drainé que l'on surnommara « NIT-DRAIN ». Nous nous sommes concentré sur le développement d'une approche de modélisation conceptuelle simple, robuste, nécessitant peu de données d'entrée et permettant une bonne représentation des concentrations en nitrate à l'exutoire d'un bassin versant agricole drainé. Egalement, l'approche intégrera le concept de reliquat entrée hiver (REH). Ce stock d'azote potentiellement lixiviable, suite à l'arrivée des premières pluies hivernales, pourrait être considéré comme un indicateur de pression azotée du sol au début de la saison de drainage agricole. Nous reviendrons, ainsi, sur les hypothèses de base qui marquent le champ d'application du modèle et présenterons les différentes approches de modélisation qui ont été testées sur les données du bassin versant agricole de Chantemerle (36 ha) avant de valider une version finale stable et opérationnelle.

### II.1.2 Présentation des données et du site d'étude

Le bassin versant de Chantemerle est situé dans le département de Seine et Marne (77) sur la commune d'Aulnoy (Figure 6). Il fait partie des sites suivis dans le cadre du GIS-ORACLE (Groupement d'Intérêt Scientifique - Observatoire de Recherche sur les bassins versants ruraux Aménagés pour les Crues, les Etiages et la qualité de l'eau).

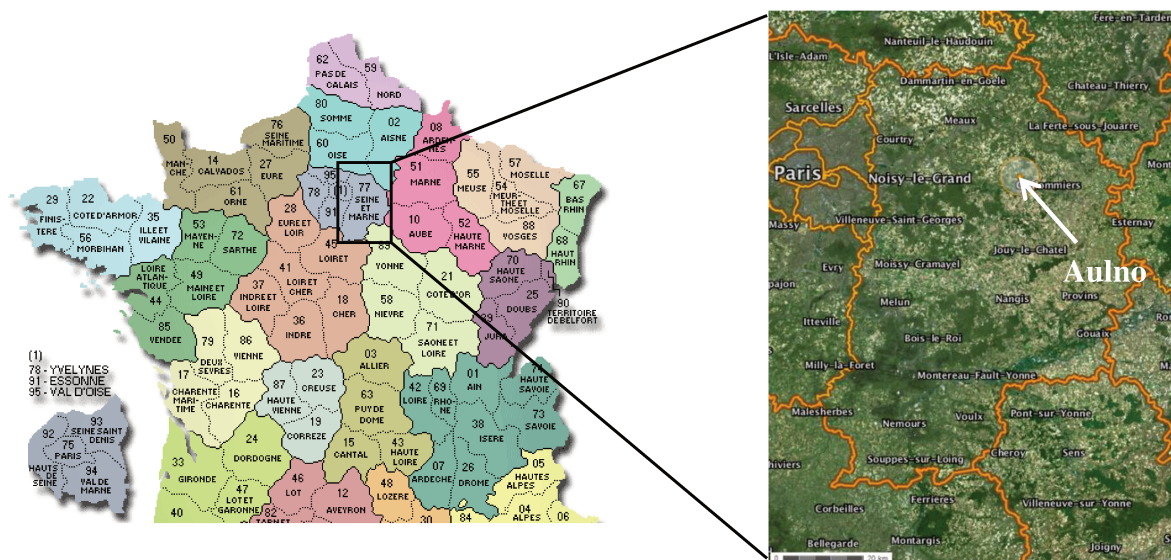


Figure 6: Localisation de la zone d'étude (Bassin versant agricole de Chantemerle)

Chantemerle est connu aussi par l'appellation « Gobard » à l'attention de Mr. Gobard, gestionnaire de la majeure partie des parcelles agricoles qui constituent le bassin versant. Ce

bassin versant, intégralement drainé par des tuyaux enterrés, est composé d'un ensemble de parcelles agricoles totalisant une superficie de 36 ha. Le sol du bassin versant est de type luvisol lessivé et de texture limoneuse avec une conductivité hydraulique à saturation avoisinant les 27.2 cm par jour et une porosité de drainage de l'ordre de 4.26 %. Les drains sont posés en moyenne à 90 cm de profondeur avec un espacement de 10 à 12 m.

Depuis septembre 2008, l'exutoire du bassin versant est équipé d'un dispositif de mesure de débit. Ainsi, un seuil triangulaire et un codeur limnimétrique (OTT-SE 200) sont installés à la sortie du collecteur principal afin de mesurer, automatiquement, la hauteur d'eau au pas de temps horaire (*Figure 7*). La hauteur d'eau est ensuite transformée en un débit moyennant une courbe de tarage préalablement calibrée.

Egalement, l'exutoire est équipé d'un dispositif automatique de collecte d'eau en vue d'une analyse de sa qualité, et d'une sonde SCAN Spectro-UV qui mesure les concentrations en nitrate à un pas de temps préalablement défini.



Figure 7: Dispositif de mesure de hauteur d'eau (seuil triangulaire), installé à l'exutoire du bassin versant agricole de Chantemerle

Une station météo est installée à Boissy-le-Châtel (48°49'15"N 3°08'19"E) afin de mesurer les variables hydrologiques (ex. Pluie, ETP, Température). En effet, un pluviomètre à auget basculeur est en place pour mesurer en continue la quantité de pluie tombée. De même,

l'évapotranspiration potentielle (ETP) est extraite de la base de donnée SAFRAN (Vidal et al., 2010). Elle est calculée à partir de la formule de Penman-Monteith au pas de temps journalier.

Les données disponibles qui seront utilisées pour le développement du modèle couvrent la période du 01/09/2008 au 31/08/2012, totalisant ainsi quatre (4) années hydrologiques. Les données de pluie et d'évapotranspiration potentielle (ETP) sont disponibles au pas de temps journalier contrairement aux observations des débits et concentrations en nitrate qui sont mesurées à un pas de temps plus fin (1 h et 15 min, respectivement). Une agrégation au pas de temps journalier a été nécessaire afin d'homogénéiser les données d'entrée. Ceci en calculant la moyenne des valeurs observées sur une journée.

### II.1.3 Hypothèses de modélisation

#### II.1.3.1 Variabilité de la concentration en nitrate

Etudier la variabilité de la concentration en nitrate permet de quantifier l'information perdue en transformant les données de concentration d'un pas de temps fin (15 min) à un pas de temps journalier. Nous avons donc calculé les moyennes des concentrations en nitrate pondérées par les débits sur une journée (Equation II.1) et les écarts-type correspondants. La Figure 8 (partie gauche) montre la relation entre les valeurs d'écart type et les concentrations en nitrate. La variabilité des données de concentration (écarts-type) est présentée par le graphique sous forme de boxplot (Figure 8, partie droite).

$$C NO_3^- = \frac{\sum_j(Q*C)}{\sum_j Q} \quad (\text{II.1})$$

Avec,

Q : débit au pas de temps 15 min ;

C : concentration en nitrate au pas de temps 15 min.

La Figure 8 montre que les valeurs moyennes journalières des concentrations en nitrate varient essentiellement entre 50 et 70 mg.NO<sub>3</sub><sup>-</sup>/l. Les écarts-type évoluent principalement entre 0 et 3.12 mg.NO<sub>3</sub><sup>-</sup>/l avec une moyenne de 1.11 mg.NO<sub>3</sub><sup>-</sup>/l en excluant les valeurs extrêmes. En d'autres termes, nous supposons acceptable un écart-type maximal de 3.12 mg.NO<sub>3</sub><sup>-</sup>/l et moyen de 1.11 mg.NO<sub>3</sub><sup>-</sup>/l en passant d'un pas de temps 15 min à un pas de temps journalier.

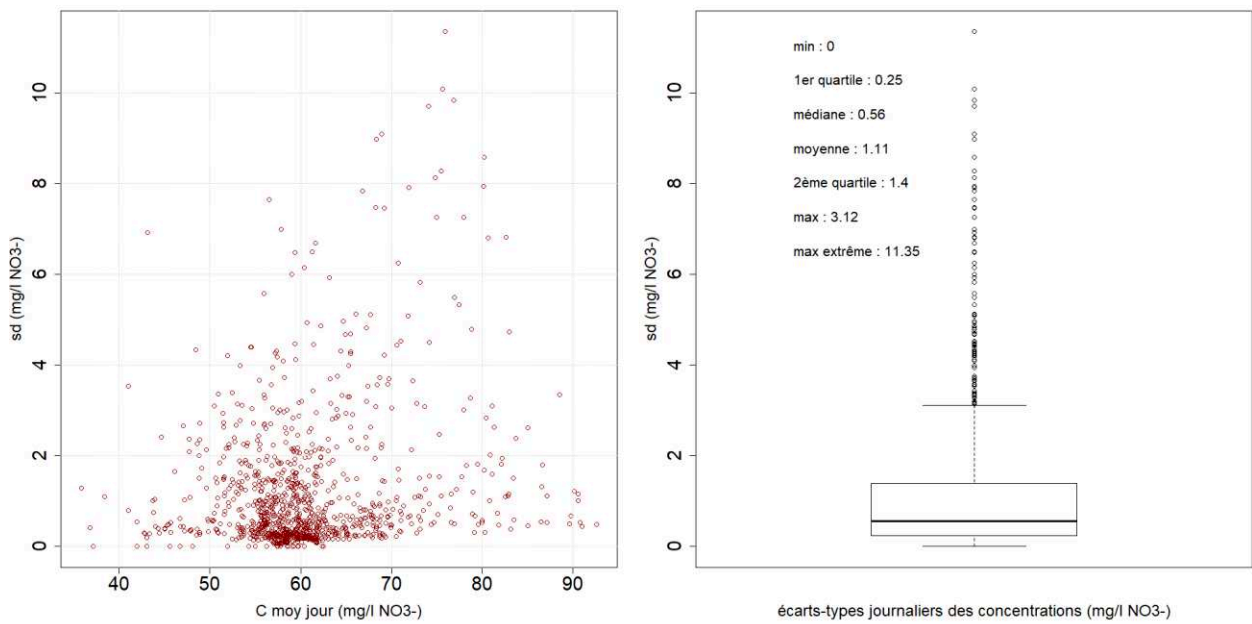


Figure 8: La variabilité horaire des concentrations en nitrate

L'évolution des concentrations en nitrate en fonction du temps est représentée sur la Figure 9. Les traits « pleins » de couleur rouge correspondent aux données mesurées au pas de temps de 15 minutes alors que les points en bleu correspondent aux mesures moyennées sur une journée.

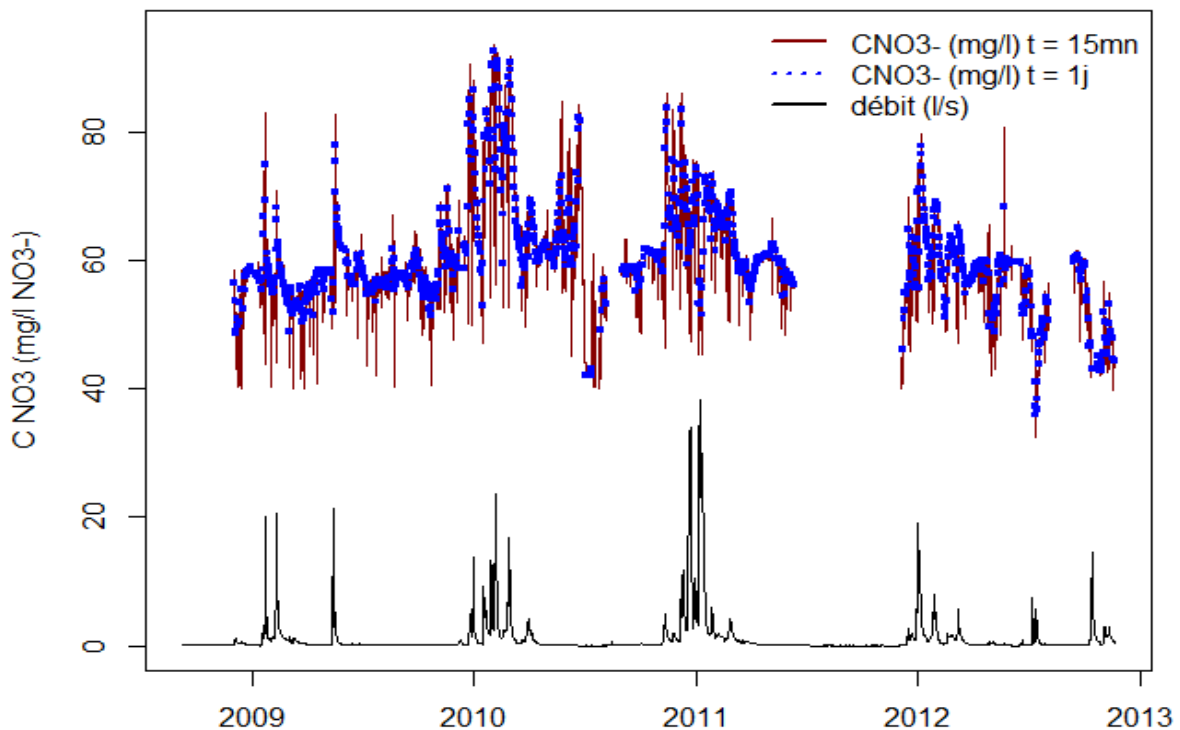


Figure 9: La transformation des données de concentration en nitrate d'un pas de temps 15 min "rouge" en pas de temps journalier "bleu". Données observées sur le site de Gobard « Chantemerle »



Il est à noter que les lacunes observées dans la série des concentrations sont généralement dues à l'absence du débit. Le passage au pas de temps journalier engendre une perte d'information sur les évaluations des concentrations extrêmes de nitrate. En effet, les pics de concentration observés au pas de temps infra-horaire sont systématiquement plus importants que ceux observés en agrégeant les données au pas de temps journalier. Nous concluons que les données au pas de temps journalier suffisent pour cette phase de construction du modèle.

### II.1.3.2 La période hivernale, un moteur de la lixiviation des nitrates

Dans cette sous-section, nous analysons la dynamique des nitrate en calculant le cumul des observations de flux pour chaque année hydrologique (Figure 10). Le flux total exporté  $f$  est calculé pour chaque année hydrologique «  $n$  » de septembre à aout suivant la formule :

$$f = \sum_n(Q * C) \quad (\text{II.2})$$

La Figure 10 montre qu'en moyenne, 77% du flux total exporté, par année hydrologique, est lixivié avant le mois de mars confirmant ainsi le rôle prédominant du stock d'azote disponible dans le sol à l'entrée de l'hiver (assimilé au REH). Un résultat similaire a été obtenu par Kladviko et al. (1991), validant ainsi l'hypothèse stipulant que les exportations de nitrate sont majoritaires durant les saisons d'automne et d'hiver en climat tempéré.

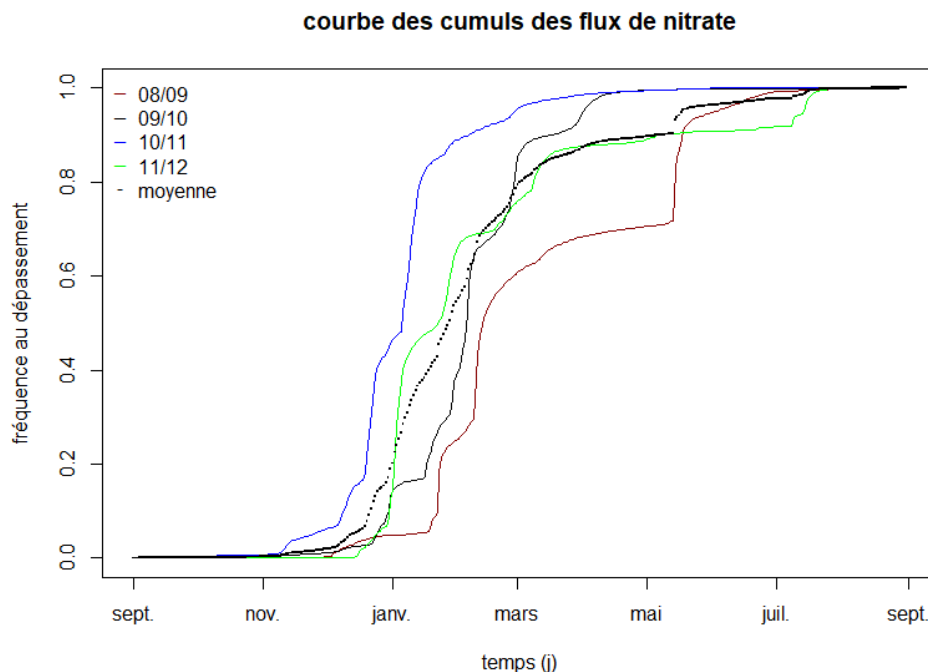


Figure 10: Les courbes de cumul annuel des flux de nitrate, exprimés par leurs fréquences au dépassement

Cette hypothèse est valable si on néglige l'apport des pratiques agricoles comme les fertilisations et des réactions biogéochimiques telles que la minéralisation et la dénitrification qui peuvent avoir un impact significatif sur les variations du stock de nitrate dans le sol. Dans

la région d'étude, les fertilisants sont généralement appliqués durant la saison de printemps (à partir du mois de mars). De plus, les réactions biogéochimiques sont supposées négligeables en hiver à cause de la faible température de l'air.

### II.1.3.3 Décomposition de l'espace « drain-interdrain » en un ensemble de compartiments

La décomposition du sol en différents compartiments permet de prendre compte séparément le transfert rapide et lent des nitrates dans le sol. Ces modes de transfert sont particulièrement dus à la présence des drains dans le sol.

L'approche adoptée par Branger et al. (2009) pour développer le modèle PESTDRAIN s'appuie sur la séparation de l'espace du sol compris entre le drain et l'interdrain en deux compartiments. Le premier compartiment « rapide » se situe proche du drain et se caractérise par une vitesse de transfert importante due à l'effet du drain et à la présence des macropores. Le deuxième compartiment « lent » est situé proche de l'interdrain et se caractérise par des vitesses de transfert très faibles (Paris, 2004). Le transfert rapide et vertical vers le drain se produit généralement au moment des précipitations alors que le transfert lent est généralement décrit par la lixiviation horizontale des polluants, liée à l'écoulement de la nappe perchée vers le drain. La somme des contributions de la nappe perchée et celle de la recharge forment le débit total qui s'écoule à l'intérieur des drains (Figure 11).

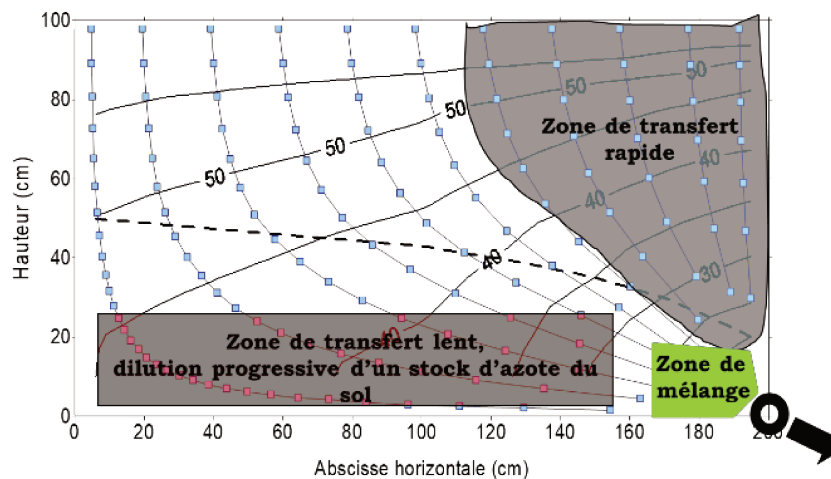


Figure 11: Description de la partie responsable des transferts rapides (proche du drain) et celle responsable des transferts lents (loin du drain). La distance entre deux points situés sur la même ligne de courant est équivalente à une heure de transfert ; (Branger et al., 2009) adapté

### II.1.3.4 Description des phénomènes d'entraînement et de dilution des nitrates

La combinaison des variations du stock et de la vitesse de transfert des nitrates dans le sol engendre soit un entraînement ou une dilution des nitrates à la sortie du réseau de drainage. Ces

phénomènes ont été décrits par Arlot (1999). Pour simplifier, nous pouvons définir l'effet d'entraînement par l'évacuation d'une eau très concentrée en nitrate à travers le compartiment rapide (Figure 12.a), engendrant une augmentation systématique des concentrations en nitrate lors d'un évènement de pluie intense. A l'inverse, l'effet de dilution est obtenu par l'évacuation d'une eau peu chargée en nitrate due à l'épuisement du stock dans le compartiment rapide, engendrant une diminution de la concentration en nitrate pendant un évènement de crue (Figure 12.b).

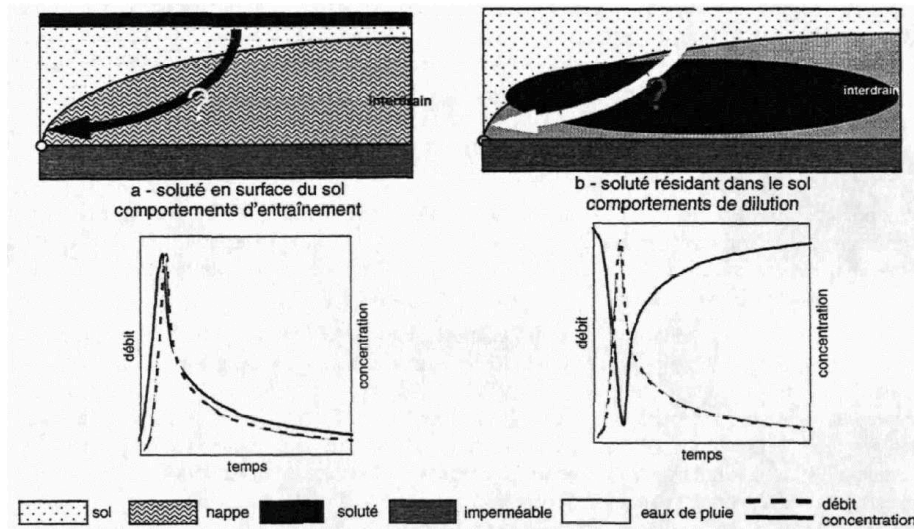


Figure 12: Schéma simplifié présentant à gauche l'effet d'entraînement et à droite l'effet de dilution des nitrates ; D'après Arlot (1999)

Dans la pratique, l'entraînement des nitrates est généralement observé en début de saison de drainage car en cette période de l'année le stock d'azote potentiellement lixiviable du sol est important. Les premières pluies hivernales vont entraîner une quantité importante de nitrate initialement située dans la partie superficielle du sol et proche du drain, générant ainsi des concentrations en nitrate supérieures à la moyenne. Il est à noter que les épisodes d'entraînement des nitrates peuvent être observés, également, au printemps suite aux fertilisations apportées au sol par les agriculteurs (voir Figure 9). L'épuisement graduel et continu du stock d'azote durant la saison de drainage intense implique l'occurrence des effets de dilution engendrant ainsi des valeurs de concentration en nitrate en dessous de la moyenne.

Nous pouvons dès à présent remarquer l'analogie qui existe entre les phénomènes d'entraînement et de dilution et l'hétérogénéité des transferts de nitrate entre le drain et l'interdrain. En effet, le phénomène d'entraînement des nitrates pourrait être associé aux transferts observés dans le compartiment rapide. De la même manière, l'effet de dilution pourrait être associé aux transferts observés dans le compartiment lent.

### II.1.3.5 Considération de la dynamique journalière des flux de nitrate

Le transfert des nitrates dans le réservoir lent est supposé présenter des variations à l'échelle saisonnière contrairement au réservoir rapide qui présente des variations à l'échelle de l'évènement. Ces deux dynamiques ont été mis en avant par Arlot (1999) dans sa thèse en discutant des possibilités de couplage entre une modélisation saisonnière et événementielle.

Ainsi, les concentrations en nitrate provenant d'un compartiment profond et loin du drain pourraient être à l'origine des faibles variations de concentration à la sortie du drain. A l'inverse, les concentrations sortantes d'un compartiment superficiel et proche du drain peuvent être associées aux fortes variations de concentration observées à l'échelle d'un évènement de crue. La Figure 13 illustre la modélisation d'un lessivage de soluté résidant en fond de nappe. La courbe 1 reproduit un comportement saisonnier avec une diminution exponentielle et continue de la concentration du soluté dans le sol. A l'inverse, le résultat d'un modèle couplé (saisonnier & événementiel) illustré par la courbe 2 caractérise des comportements de dilution où nous remarquons une forte baisse des concentrations en soluté expliquée par le passage d'une crue, suivie par une augmentation des concentrations et un retour à l'état d'équilibre.

Les variations de la concentration des nitrates en sortie du réservoir lent sont très faibles voir constantes à l'échelle d'un évènement, alors que les concentrations des nitrates en sortie du réservoir rapide peuvent varier en fonction de la disponibilité du stock d'azote dans la partie superficielle du sol.

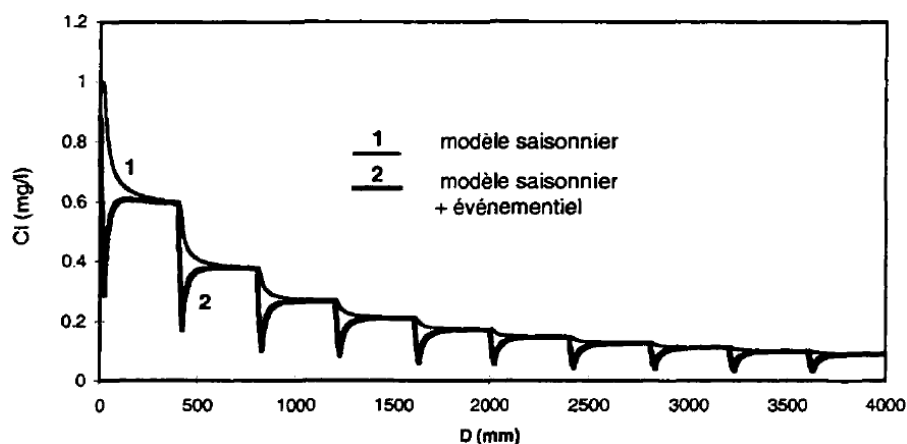


Figure 13: Exemple d'un couplage d'une modélisation saisonnière et événementielle des concentrations d'un soluté résidant en fond de nappe (Arlot, 1999) adapté

### II.1.3.6 Décomposition du débit de drainage en plusieurs contributions

Dans ce qui suit, nous nous intéresserons à la décomposition du débit de drainage afin de différencier les parts qui contribuent aux phénomènes d'entraînement et de dilution des nitrates discutés dans la section précédente.

En effet, le débit instantané observé à l'exutoire d'un sous bassin versant drainé peut-être soit :

- Divisée en deux composantes à l'aide de la méthode de séparation d'hydrogramme de crue développée par Eckhardt (2005) : Un débit de base qui caractérise généralement le soutien de la nappe en période d'étiage et un fort débit généré par la recharge nette de la nappe pendant la saison de drainage intense (Figure 14). Un nombre de chercheurs se sont intéressés à l'étude de la relation entre le flux de nitrate et le débit exporté à l'exutoire d'un bassin versant drainé. Beaucoup d'entre eux estiment que le débit de base contribue, à lui seul, à l'exportation de plus de 50% du flux annuel de nitrate (Jordan et al., 1997; Schilling and Zhang, 2004; Spahr et al., 2010). Dans un bassin versant limité par une couche imperméable peu profonde, Ruiz et al. (2002) considèrent uniquement la composante « débit de base » pour simuler les épisodes de dilution des concentrations en nitrates. Dans ce qui suit, nous supposerons que la part « débits de base » est attribuée au réservoir lent alors que la part restante du débit contribuera au transfert rapide du nitrate à partir du réservoir situé proche du drain. La combinaison de ces deux modes de transfert du nitrate engendre la succession des phénomènes de dilution et d'entraînement observés à l'exutoire du réseau de drainage.
- Divisée en plusieurs composantes suivant l'équation II.3. Sachant que les coefficients  $a_i$  sont déterminés au moment du calage du modèle. L'index « i » correspond au nombre total des compartiments avec :  $\sum a_i = 1$ . Cette technique de séparation est intéressante lorsque le nombre de compartiment est supérieur à deux.

$$Q_T = \sum a_i Q_i \quad (\text{II.3})$$

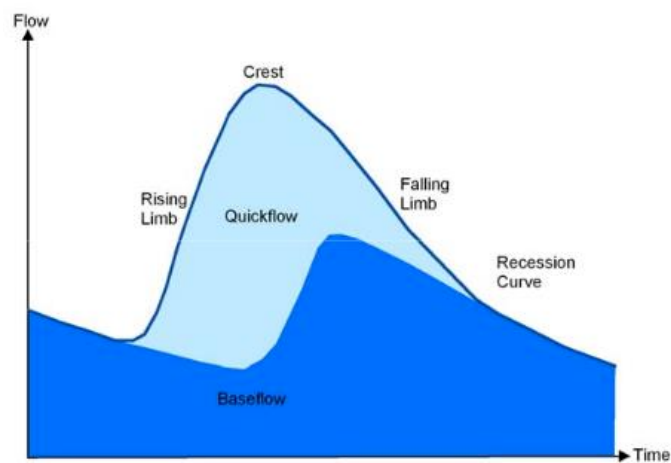


Figure 14: Décomposition typique d'un débit total en somme d'un débit de base « Baseflow » et d'un fort débit « Quickflow » ; d'après Rs (2005)

#### **II.1.4 Développement du modèle**

Les modèles agronomiques comme DNDC (Smith et al., 2020) et STICS (Li et al., 1992a, b) s'intéressent à l'estimation de la variation du stock des nitrates durant la saison de croissance des cultures. Cela implique une description détaillée du cycle biogéochimique et de la culture en place dont les données sont souvent incomplètes ou manquantes. Ces types de modèle cherche à mieux caractériser le transfert et la transformation de l'azote dans un sol agricole dans le but d'améliorer le rendement des cultures tout en ajustant les applications de fertilisants suivant le stock disponible de nitrate.

Durant cette thèse nous nous intéresserons au développement d'un modèle conceptuel de transfert des nitrates dans un milieu agricole artificiellement drainé. A l'inverse du fonctionnement des modèles agronomiques, l'approche de modélisation devrait proposer une conceptualisation simplifiée pour simuler le transfert des nitrates dans le sol en direction des drains sans tenir compte des processus de transformation de l'azote.

Notre démarche de modélisation s'inscrit dans la continuité des travaux de thèse menés par Arlot (1999) qui a étudié le processus de transfert des nitrates en milieu drainé. Ainsi, une modélisation événementielle et saisonnière de la lixiviation des nitrates a été proposée par Arlot (1999) en s'appuyant sur des équations de transfert des polluants de type exponentiel (Magesan et al., 1994). L'idée est de proposer une conceptualisation complète et continue de l'évolution des concentrations en nitrate en considérant, à la fois, les deux échelles de modélisation : (1) événementielle pour décrire la dynamique à l'échelle d'une crue et (2) saisonnière afin de prendre en compte l'évolution du stock des nitrates à l'échelle d'une saison hydrologique.

##### **II.1.4.1 Fonctions de transfert des nitrates dans le sol**

Le transfert des nitrates durant la saison hivernale dépend majoritairement du stock d'azote disponible pour la lixiviation et du débit de drainage (Arlot, 1999). Dans cette partie de l'étude, nous nous intéresserons à la simulation des concentrations en nitrate à l'exutoire d'un système de drainage agricole. L'approche de modélisation a été développée en s'appuyant sur les hypothèses suivantes :

- Nous considérons uniquement le processus de lixiviation d'un stock d'azote initial dans le sol. Aucun autre processus de transformation de l'azote n'est considéré (ex. dénitrification, minéralisation, extraction racinaire, assimilation, ...).
- En dehors de la saison de drainage intense, les apports et les pertes en nitrate se compensent.

- Le processus biochimique dans les drains est négligé.

Le mouvement de l'eau dans le sol mobilise et fait circuler l'azote disponible pour la lixiviation dans le sol. La mise en place d'un système de modélisation intégrant des fonctions de lixiviation des nitrates permet de caractériser ce processus de transfert de la surface du sol au drain enterré.

De nombreuses fonctions de transfert des nitrates dans le sol existent dans la littérature (Ma, 1991; Mantilla Morales, 1995; Ren et al., 2003). Ils se basent le plus souvent sur la relation existante entre le flux de nitrate et le débit ou sur les différentes étapes de transformation biogéochimique de l'azote dans le sol (modèles agronomique) sans pour autant s'intéresser à la variation instantanée du stock d'azote disponible à faibles profondeurs dans le sol.

Le modèle de transfert des nitrates développé par Ma (1991) puis ajusté et amélioré par Mantilla Morales (1995) se base sur une approche de couplage entre un modèle hydrologique conceptuel et un modèle géochimique. Le sol est décomposé en deux réservoirs (superficiel et profond) qui sont connectés par une fonction de diffusion verticale. Cependant, ce modèle conçu pour fonctionner sur des données d'un bassin versant quelconque, ne prend pas en considération l'évolution du stock d'azote dans le sol en présence du drainage agricole.

Dans le cadre de cette étude, les fonctions de transfert des nitrates doivent prendre en compte la présence du drainage agricole. En effet, la présence des drains modifie le comportement hydrodynamique du sol et par conséquent le mode de transfert des nitrates. En lien avec l'objectif de cette thèse, l'intégration de la variable reliquat entrée hiver (REH) dans le modèle s'avère primordiale tout en sachant que la valeur du REH doit être actualisée annuellement et répartie sur la partie superficielle du sol.

White et al. (1983) ont étudié les variations saisonnières des nitrates dans un bassin versant artificiellement drainé d'une superficie de 9 ha. Un bilan de masse hebdomadaire simplifié a été mis en place pour déduire les exportations de nitrate. Il a été constaté que les plus fortes concentrations en nitrate s'observent en automne (en début de saison de drainage) avec en moyenne 25% des flux de nitrate lixiviés en cette période. Notons ainsi que les 75% restants sont lixiviés durant la saison de drainage. White (1987) s'est intéressé dans un deuxième temps aux variations événementielles des concentrations et flux de nitrate. Il s'est basé sur une approche stochastique afin de développer une fonction de transfert des nitrates en parcelles drainées. La fonction de transfert, de type exponentiel, fait intervenir le débit, le volume de transport et la concentration initiale des nitrates (équation II.4).

$$\Delta C = C_0 \left( 1 - \exp\left(-\frac{D_0 t}{V_{st}}\right) \right) \quad (\text{II.4})$$

Avec :

$\Delta C$  : la variation horaire de la concentration des nitrates ( $\text{g/m}^3$ )

$C_0$  : la concentration initiale des nitrates ( $\text{g/m}^3$ )

$D_0$  : le taux de drainage moyen par heure ( $\text{mm/h}$ )

$V_{st}$  : le volume de transport ( $\text{mm}$ )

Cette fonction de transfert s'intéresse à la concentration initiale des nitrates qui devrait être actualisée pour chaque événement de crue. Cette variable reste difficile à acquérir et nécessite des données continues de concentration en nitrate. Arlot (1999), en s'intéressant aux transferts des nitrates sous influence du drainage agricole, a proposé une fonction de transfert de même type mais qui prend en compte l'évolution saisonnière de la quantité d'azote potentiellement lixiviable et le cumul de la lame d'eau drainée pour simuler le cumul du flux d'azote exporté en dehors de la parcelle.

$$Flux = F_0 \left( 1 - \exp\left(-\frac{CD}{z\theta}\right) \right) \quad (\text{II.5})$$

Avec,

Flux : cumul d'azote lixivié ( $\text{kg/ha}$ ) ;

$F_0$  : quantité d'azote potentiellement lixiviable ( $\text{kg/ha/an}$ ) ;

CD : cumul de la lame d'eau drainée ( $\text{mm}$ ) ;

$z$  : profondeur des drains ( $\text{mm}$ ) ;

$\theta$  : porosité de lessivage [-].

Les seuls paramètres à calibrer dans cette fonction de densité de probabilité sont  $\theta$  et  $F_0$ . Les simulations du cumul annuel d'azote lixivié par le système de drainage sont généralement satisfaisantes avec une bonne estimation de la quantité d'azote potentiellement lixiviable.

Dans ce qui suit et afin de développer les bases de notre approche de modélisation, nous intégrerons le concept d'hétérogénéité des vitesses de transfert d'un stock d'azote initial, disponible pour la lixiviation en début d'hiver. Cela servira à la construction de la version finale du modèle nitrate appelé « NIT-DRAIN ». Nous nous consacrerons à la fois au choix de la fonction de transfert (ou la fonction de vidange) et au type d'approche conceptuelle les mieux adaptés à notre contexte.



### II.1.4.2 Approche de modélisation par réservoirs

Le sol pourrait être décomposé d'un ou de plusieurs réservoirs permettant le stockage et le transfert des nitrates vers le drain. Les réservoirs du sol peuvent être disposés en série, en parallèle ou la combinaison des deux (Figure 15). Nous allons nous intéresser aux transferts de l'eau et du nitrate s'effectuant au sein de l'espace situé entre le drain et l'interdrain. Ceci en considérant le sol de la zone étudiée comme étant homogène et qu'à l'interdrain, le flux de nitrate est nul (limite verticale à flux nul).

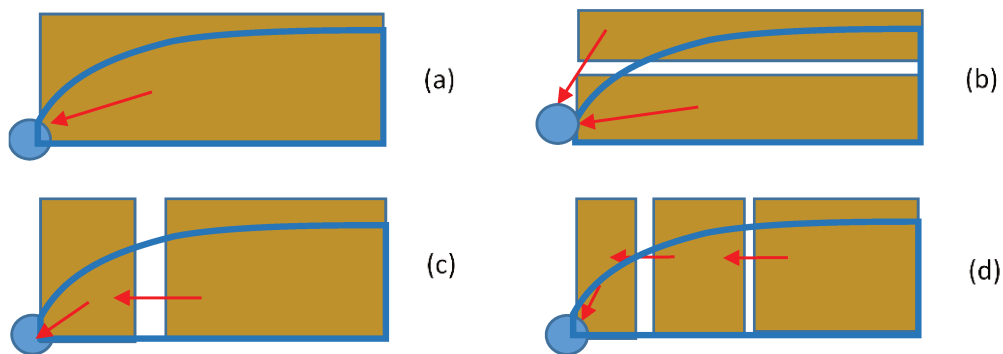


Figure 15: Différentes approches réservoirs pour caractériser le transfert des nitrates en sol drainé; (a) un seul réservoir ; (b) deux réservoirs non connectés en parallèle (le mélange s'effectue à l'exutoire de ces derniers); (c) deux réservoirs en série (d) trois réservoirs en série

L'approche de modélisation hydrologique par réservoirs suit généralement un processus conceptuel ou empirique. Elle a été largement discutée et employée pour simuler les débits exportés à l'exutoire des bassins versants. Le résultat est obtenu par la simple connaissance de la pluie, l'évapotranspiration et le calage d'un ensemble plus au moins conséquent de paramètres. La robustesse de ces modèles dépend du nombre de paramètres à calibrer (Perrin, 2000). Le recours à ce type d'approche a aussi suscité l'intérêt des chercheurs en modélisation du transfert des nitrates dans le sol. Ma (1991) puis Mantilla Morales (1995) se sont intéressés au couplage d'un modèle hydrologique (GR3) reprenant une approche de type « réservoirs » avec un modèle nitrate. Malgré une bonne prise en compte des principales composantes du cycle d'azote dans le sol et un bilan de masse calculé à chaque pas de temps, le modèle nitrate n'a pu être validé qu'approximativement.

Dans cette étude, nous partirons d'un modèle de base simple avant de développer et tester les nouvelles approches de modélisation des concentrations et flux de nitrate. La partie du sol comprise entre le drain et l'interdrain sera définie tout d'abord par un seul réservoir puis sera décomposée en un ensemble de réservoirs connectés en parallèle ou en série (Figure 15). La version définitive du modèle a fait l'objet d'un article scientifique (Chelil et al., 2022a) qui sera

présenté au chapitre suivant (II.2). Il est à noter que l'actualisation annuelle du stock d'azote permet de simuler les concentrations en période hivernale (voir section II.1.3.2) qui s'étale généralement entre le mois d'octobre-novembre de l'année en cours et le mois de mars-avril de l'année suivante.

#### II.1.4.2.1 Transfert des nitrates dans un seul réservoir

La fonction de transfert adoptée sera testée dans un premier temps sur un cas de simulation simple. Les ions nitrate seront transférés à travers un seul compartiment (Figure 15a). La quantité d'azote stockée dans ce compartiment sera actualisée le 1<sup>er</sup> novembre de chaque année. La répartition du stock d'azote à l'intérieur du compartiment est supposée homogène.

Nous supposons que le stock d'azote potentiellement lixiviable est emmagasiné dans un réservoir de lessivage « R » qui regroupe les caractéristiques suivantes (Figure 16) :

- Un reliquat entrée hiver « REH » actualisé au premier novembre de chaque année.
- Une lame d'eau drainée :  $D(t)$
- Un stock d'azote qui s'actualise en fonction du temps :  $Stock(t)$
- Un volume de lessivage  $vl$  calculé suivant la formule :

$$vl(t) = z\theta \quad (II.6)$$

Avec,

$\theta$  : porosité de lessivage ;

$z$  : profondeur du drain (mm).

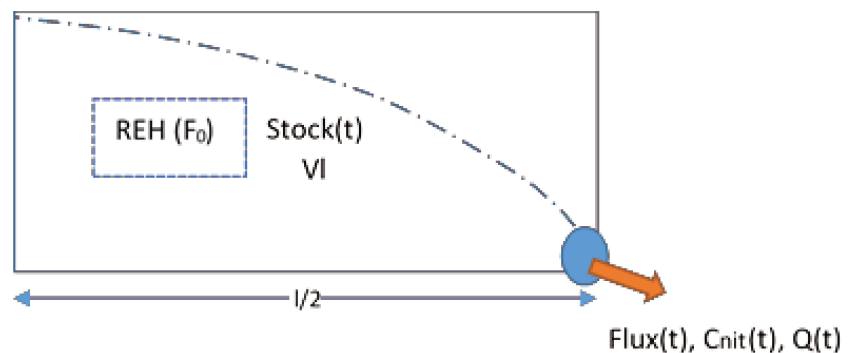


Figure 16: Schéma simplifié du réservoir de lessivage R et des principales variables et paramètres qui rentrent en jeu pour simuler le flux et les concentrations de nitrate

L'estimation de l'évolution journalière du flux et des concentrations en nitrate est possible en apportant quelques modifications à la fonction de transfert développée à la base pour simuler un cumul de flux de nitrate à l'échelle d'un cycle complet de lessivage (formule II.5).

Le flux de nitrate (formule II.7) issu du réservoir (R) est estimé en fonction des évolutions journalières du débit de drainage  $Q(t)$  et du stock d'azote disponible pour la lixiviation  $Stock_t$ .

$$Flux_t = Stock_t \left( 1 - \exp \left( - \frac{Q(t)}{vl(t)} \right) \right) \quad (II.7)$$

Le volume de lessivage  $vl$  est considéré comme un paramètre de calage. Notons que le stock d'azote est actualisé par la valeur du reliquat entrée hiver au premier novembre de chaque année :

$$Stock_0 = REH \quad (II.8)$$

Un bilan de masse journalier est calculé à chaque pas de temps de simulation afin de réévaluer le stock d'azote piégé au sein du réservoir R.

$$Stock_{t+1} = Stock_t - Flux_t \quad (II.9)$$

Les transformations biogéochimiques de l'azote réactif dans le sol ne sont pas considérées en supposant que le temps de concentration de l'eau dans le sol est réduit en présence d'un système de drainage agricole (section II.1.3.2). Les concentrations en nitrate sont simulées au pas de temps journalier en divisant le flux par le débit de drainage.

$$C_{NO_3^-} = Flux(t)/Q(t) \quad (II.10)$$

Le calage des paramètres du modèle est effectué tout d'abord sur les données de concentrations en nitrate observées à l'exutoire du système de drainage du site de Chantemerle. Les données sont agrégées en amont, d'un pas de temps de 15 min à un pas de temps journalier (voir la section II.1.2) et couvrent une période de 4 ans (2008-2012). Il est rappelé que le volume de lessivage est considéré comme étant un paramètre de calage. Son intervalle de variation est borné entre 0 et 0.45 pour préserver son sens physique.

Les résultats de calage sont illustrés sur la Figure 17. Nous remarquons que les concentrations en nitrate simulées (courbe orange) varient à l'échelle saisonnière et sont indépendantes du changement de débit à l'échelle d'un évènement de crue. D'après les hypothèses de modélisation, décrites dans la section II.1.3, nous pouvons considérer que le modèle, à un seul réservoir R, caractérise les écoulements lents et met en avant le transfert à l'échelle saisonnière. Il serait donc intéressant d'intégrer un deuxième réservoir permettant de prendre en compte les autres contraintes de modélisation imposées à savoir : la variation de la vitesse de transfert et les phénomènes d'entraînement et de dilution des nitrates à l'échelle évènementiel.

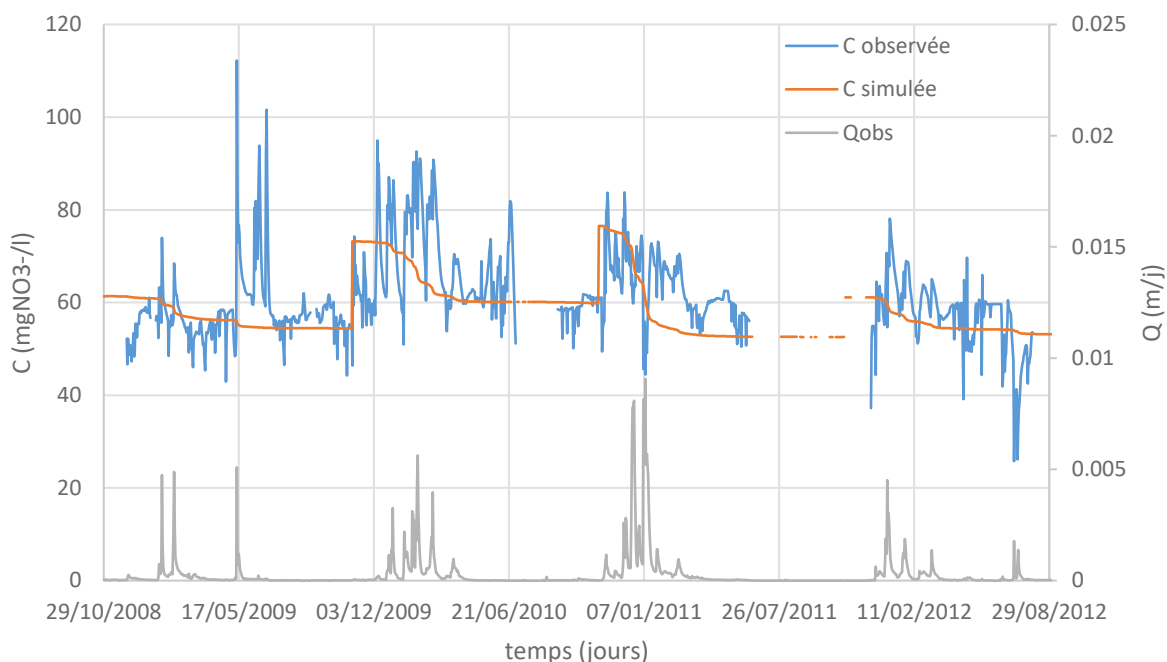


Figure 17: Concentration en nitrate simulées en utilisant l'approche de base

Les valeurs de REH sont estimées simultanément au 1<sup>er</sup> novembre de chaque année hydrologique simulée. Le Tableau 1 présente une comparaison entre les valeurs de REH mesurées sur le terrain et celles estimées avec le modèle nitrate à un seul réservoir. Les REH mesurées proviennent du réseau de mesure *Qualichamps* piloté par la chambre d'agriculture d'Ile de France (Seine et Marne). Ces mesures de REH représentent des moyennes de reliquat azoté pondérées par la surface de culture. Une corrélation intéressante semble se dégager entre la mesure et l'estimation du REH ( $R^2 = 0.2$ ).

Tableau 1: Comparaison des valeurs de REH mesurées et estimées avec l'approche de base à un réservoir

Année hydrologique	REH estimé	REH mesuré
2008-2009	62.39	49.4
2009-2010	74.39	88.9
2010-2011	77.75	73
2011-2012	62.06	81.3

Contrairement aux concentrations, les simulations des flux de nitrate sont très satisfaisantes (Figure 18) et s'accompagnent des critères de performance NSE, KGE proches de l'unité. En effet, la dynamique journalière des concentrations en nitrate n'a pas d'impact significatif sur le flux exporté. Dans la littérature, la majorité des articles qui traitent le sujet de la modélisation des nitrates se basent essentiellement sur les simulations des flux de nitrate (White, 1987; Ren et al., 2003; Molenat et al., 2008). Ce travail de thèse est essentiellement axé sur les simulations

des concentrations en nitrate, plus exigeantes en termes d'évaluation et plus sensibles aux variations du REH que les flux.

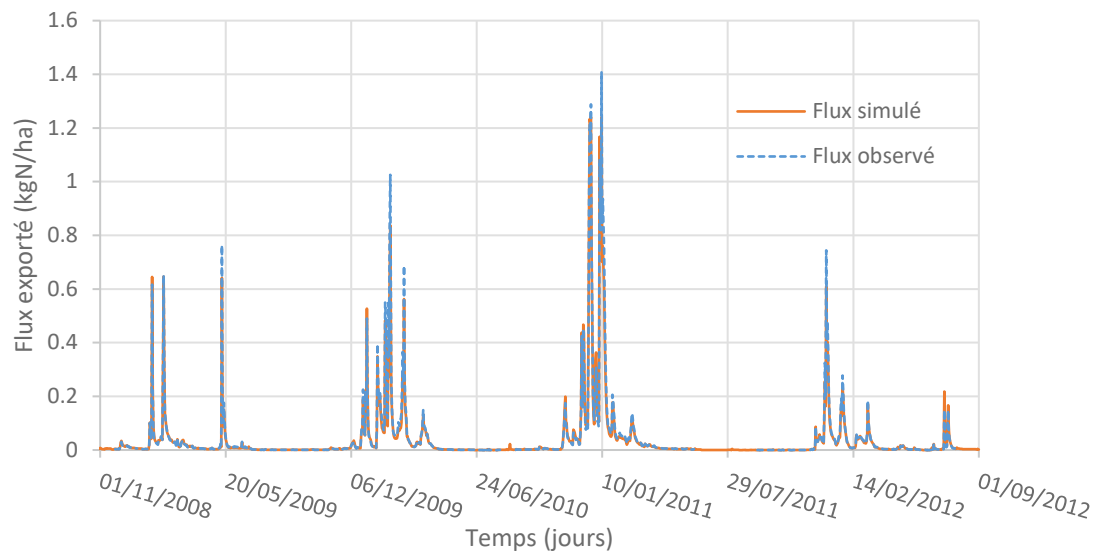


Figure 18: Flux de nitrate simulés en utilisant l'approche de base

L'approche de base qui intègre le transfert des nitrates dans un réservoir nous a permis de constater que les simulations de concentration en nitrate suivent une tendance saisonnière. En effet, le stock d'azote présent dans le réservoir conceptuel (R) s'épuise lentement en fonction du débit de drainage. La dynamique événementielle n'est pas caractérisée par cette approche. La prochaine étape consiste à rajouter un deuxième réservoir disposé parallèlement au premier afin de prendre en compte les fluctuations journalières des concentrations.

#### II.1.4.2.2 Transfert des nitrates dans deux réservoirs en parallèle non connectés

Dans cette section, nous proposons d'étudier l'hétérogénéité des vitesses de transfert des nitrates dans le sol par le rajout d'un deuxième réservoir (Figure 15.b). De ce fait, le réservoir R décrit dans l'approche de base sera appelé « Rp » (Réservoir Profond). Ce dernier décrira le transfert lent des nitrates et permettra de représenter les variations saisonnières de la concentration en nitrate. Ensuite, le nouveau réservoir « Rs » (Réservoir Superficiel) sera introduit pour mettre en avant les effets d'entraînement et de dilution événementiels. Il caractérisera, de ce fait, les écoulements rapides et superficiels des nitrates.

Le débit total  $Q_T(t)$  est réparti sur les deux réservoirs en calculant tout d'abord un débit de base à l'aide du filtre d'Eckhardt (2005). Le débit de base  $Q_b(t)$  est, dans ce cas, calculé suivant l'équation II.11 en considérant  $a$  et  $b$  comme des paramètres de calage.

$$Q_b(t) = \frac{(1-b)*a*Q_b(t-1)+(1-a)*b*Q_T(t)}{1-a*b}$$

$$Q_T(t) = Q_p(t) + Q_b(t) \quad (\text{II.11})$$

Pareil que pour le débit, le stock d'azote potentiellement lixiviable, défini par la variable d'entrée du modèle (REH), est initialement partagé entre les deux réservoirs à l'aide du paramètre  $\alpha \in [0,1]$ . La partie principale du stock est affectée au réservoir profond Rp alors que le reste du stock est attribué au réservoir rapide Rs.

$$Fin_{t_0}^{Rs} = \alpha * REH$$

$$Fin_{t_0}^{Rp} = (1 - \alpha) * REH$$

$$REH = Fin_{t_0}^{Rs} + Fin_{t_0}^{Rp} \quad (\text{II.12})$$

$Fin_{t_0}^{Rs}$  et  $Fin_{t_0}^{Rp}$  correspondent aux stocks d'azote affectés aux réservoirs Rs et Rp, respectivement, au pas de temps initial  $t_0$  (au début de chaque année hydrologique).

Pour un suivi interannuel, le stock total d'azote présent dans le sol est actualisé au mois de novembre par une valeur de REH équivalente. Cette dernière est estimée chaque année et ensuite comparée avec les valeurs de REH mesurés sur le terrain. Il faudrait prendre en considération les incertitudes sur les données de reliquats mesurées car ces dernières ont été récoltées à partir d'enquêtes auprès de l'agriculteur et de la chambre d'agriculture du département Seine et Marne 77 (Base de données Qualichamps) et non pas localement au niveau du bassin versant agricole de Chantemerle.

Il est à noter que, dans ce cas de figure, les deux réservoirs ne sont pas connectés. Nous considérons que le flux total de nitrate simulé ( $Flux_t$ ) est la somme des flux sortants des deux réservoirs Rs et Rp (Figure 15b).

Les quantités de nitrate  $Fsur_t$  et  $F0_t$  exportée des compartiments  $Fin^{Rs}$  et  $Fin^{Rp}$ , respectivement, sont calculées suivant la formule II.13.

$$Fsur_t = Fin_t^{Rs} \left( 1 - \exp\left(-\frac{Q_T(t)-Q_b(t)}{vl_1}\right) \right)$$

$$F0_t = Fin_t^{Rp} \left( 1 - \exp\left(-\frac{Q_b(t)}{vl_2}\right) \right) \quad (\text{II.13})$$

$vl_1$  et  $vl_2$  correspondent aux fractions porales contribuant à la lixiviation des nitrates dans le réservoir superficiel Rs et profond Rp, respectivement.

Le stock d'azote potentiellement lixiviable de chaque réservoir au pas de temps  $t+1$  est calculé suivant le bilan de masse décrit par l'équation II.14.

$$\begin{aligned} Fin_{t+1}^{Rs} &= Fin_t^{Rs} - Fsur_t \\ Fin_{t+1}^{Rp} &= Fin_t^{Rp} - F0_t \end{aligned} \quad (II.14)$$

Nous testerons cette deuxième approche de modélisation sur les mêmes données (Chantemerle ; 2008-2012). Le Tableau 2 regroupe les valeurs des quatre paramètres d'entrée qui ont été estimés dans l'optique de réduire l'écart entre les simulations et les observations journalières des concentrations en nitrate. Le Tableau 3 présente une comparaison entre les valeurs estimées et mesurées de REH.

Tableau 2: Valeurs des paramètres après ajustement avec l'approche à deux réservoirs en parallèle

a	0.101
b	0.054
$vl_2$	0.02
$\alpha$	0

Tableau 3: Comparaison des valeurs de REH mesurées et estimées avec l'approche à deux réservoirs en parallèle

Année hydrologique	REH estimé	REH mesuré
2008-2009	75.3	49.4
2009-2010	89.22	88.9
2010-2011	93.65	73
2011-2012	73.76	81.3

Les simulations de flux sont très satisfaisantes. Les coefficients NSE (Nash and Sutcliffe, 1970) obtenus sont de l'ordre de 0.97. Pour plus de détail sur la formule de calcul du NSE, le lecteur peut se référer à l'article portant sur le développement du modèle nitrate, présenté dans le chapitre II.2.

En ce qui concerne la variation du stock des nitrates, nous nous attendions à un épuisement rapide de stock du réservoir superficiel (Rs) donnant suite à des effets d'entraînement au début de la saison hydrologique. Néanmoins, paramétrer un épuisement rapide de ce stock à l'aide de l'équation de transfert exponentielle engendre des pics irréalistes de concentration. D'où la non prise en compte systématique du réservoir rapide lors de l'étape de calage ( $\alpha = 0$ ).

Les concentrations en nitrate simulées par cette approche sont illustrées dans la Figure 19. Nous remarquons une hydrodynamique saisonnière correcte avec des simulations de concentration acceptables (NASH = 0.2). Le pic de concentration observé durant le printemps de l'année 2009 n'a pas été correctement simulé à cause de la non prise en compte du réservoir superficiel responsable de l'entraînement des nitrates et des fertilisations ponctuelles printanières.

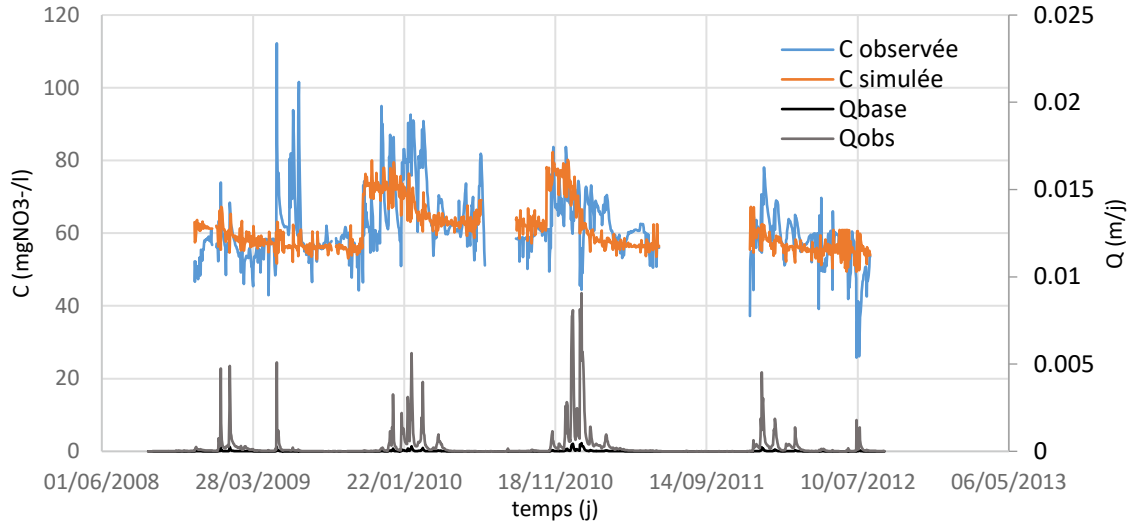


Figure 19: Les concentrations en nitrate simulées en utilisant l'approche à deux réservoirs en parallèle

### II.1.4.2.3 Transfert des nitrates dans deux réservoirs en série

Dans cette approche nous allons considérer que le transfert des nitrates s'effectue à travers deux réservoirs placés en série (Figure 15c). Un réservoir  $Rp$  proche de l'interdrain recevra la totalité du stock initial d'azote ( $Fin_0^{Rp} = REH$ ). Ensuite, à l'aide des fonctions de transfert exponentielles (équation II.15), le flux de nitrate sera progressivement exporté vers le réservoir  $Rs$  puis vers le drain.

$$\begin{aligned} F_{sur_t} &= Fin_t^{Rs} \left( 1 - \exp\left(-\frac{Q(t)}{vl_1}\right) \right) \\ F_{0_t} &= Fin_t^{Rp} \left( 1 - \exp\left(-\frac{Qb(t)}{vl_2}\right) \right) \end{aligned} \quad (II.15)$$

Un bilan de masse est effectué à chaque pas de temps (équation II.16) afin de mettre à jour la quantité d'azote stockée dans chaque réservoir.

$$\begin{aligned} Fin_{t+1}^{Rs} &= Fin_t^{Rs} - F_{sur_t} + F_{0_t} \\ Fin_{t+1}^{Rp} &= Fin_t^{Rp} - F_{0_t} \end{aligned} \quad (II.16)$$

Les mêmes données d'entrée utilisées pour tester les deux approches précédentes seront réutilisées dans ce cas. Les Tableau 4 et Tableau 5 regroupent respectivement les valeurs des paramètres et des REH ajustées sur les données observées des concentrations en nitrate en utilisant le critère objectif NSE. Malgré l'existence d'une corrélation positive entre les REH estimés et mesurés, nous notons une surestimation systématique des valeurs estimées de REH par le modèle.



Tableau 4: Paramètres ajustés avec l'approche à deux réservoirs en série

$a$	0.132
$b$	0.056
$vl_2$	0.04

Tableau 5: Comparaison des valeurs de REH mesurées et estimées avec l'approche à deux réservoirs en série

Année hydrologique	REH estimé	REH mesuré
2008-2009	91.63	49.4
2009-2010	120	88.9
2010-2011	119.5	73
2011-2012	103	81.3

La répartition du débit de drainage et les simulations des concentrations en nitrate basées sur l'approche de modélisation à deux réservoirs en série sont présentées dans la Figure 20. Nous pouvons observer que les concentrations en nitrate simulées (courbe orange) sont bien représentées par rapport aux observations (courbe bleue) et que la dynamique saisonnière est respectée. Un critère NSE égale à 0.44 a été obtenu pour l'ensemble de la période simulée.

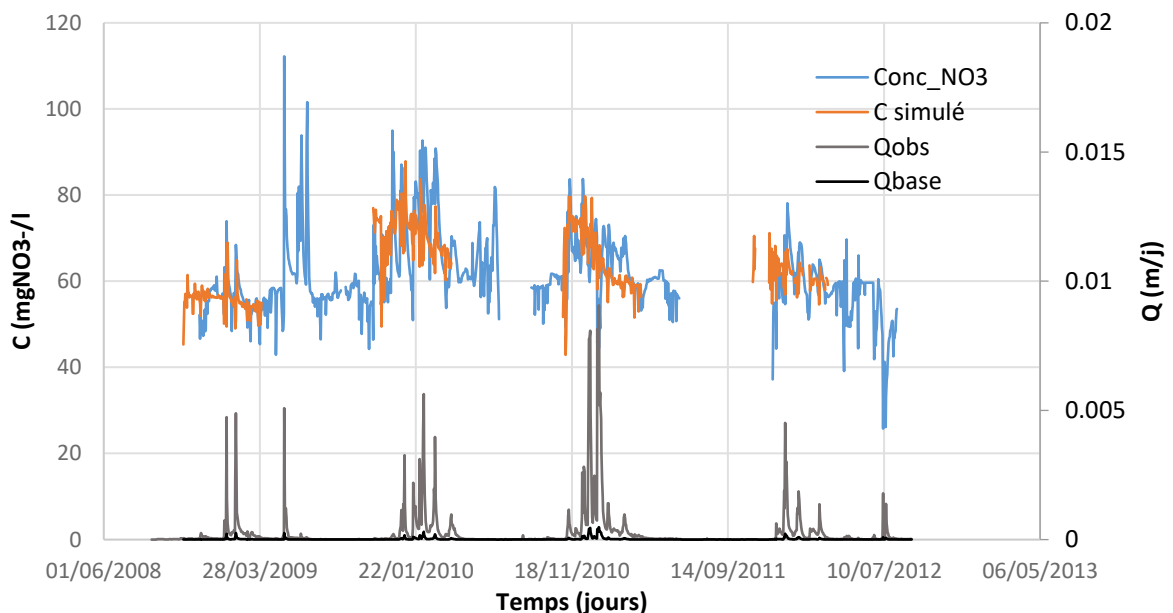


Figure 20: Les concentrations en nitrate simulées en se basant sur l'approche à deux réservoirs en série

La Figure 21 décrit la relation linéaire existante entre les observations et les simulations des concentrations en nitrate. Nous notons une assez bonne corrélation entre ces deux variables. Néanmoins, un effort supplémentaire est nécessaire afin d'améliorer encore davantage la qualité des concentrations en nitrate simulées ainsi que les estimations de REH. Il faudra explorer les mécanismes de vidange de chaque réservoir. En effet, si la dynamique de transfert des nitrates est correcte, les phénomènes d'entraînement et de dilution de nitrate sont mal pris en compte par l'approche de modélisation intégrant deux réservoirs en série (Figure 22).

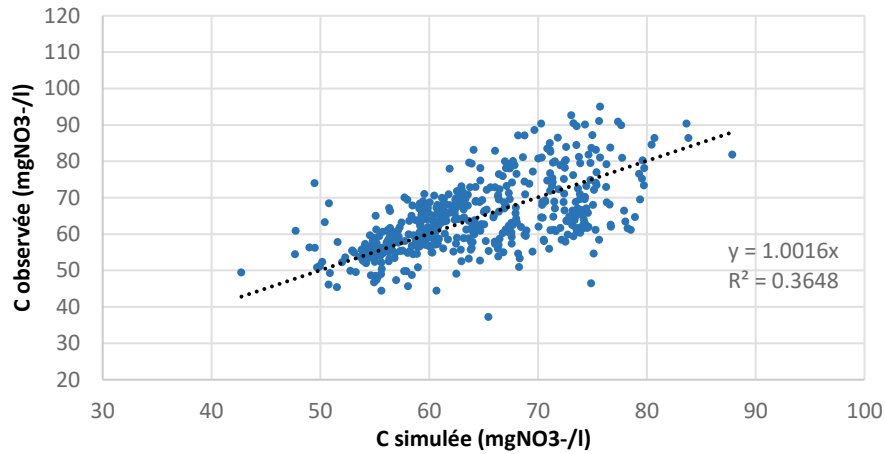


Figure 21: La corrélation entre les concentrations en nitrate observées et simulées en se basant sur l'approche de modélisation à deux réservoirs en série

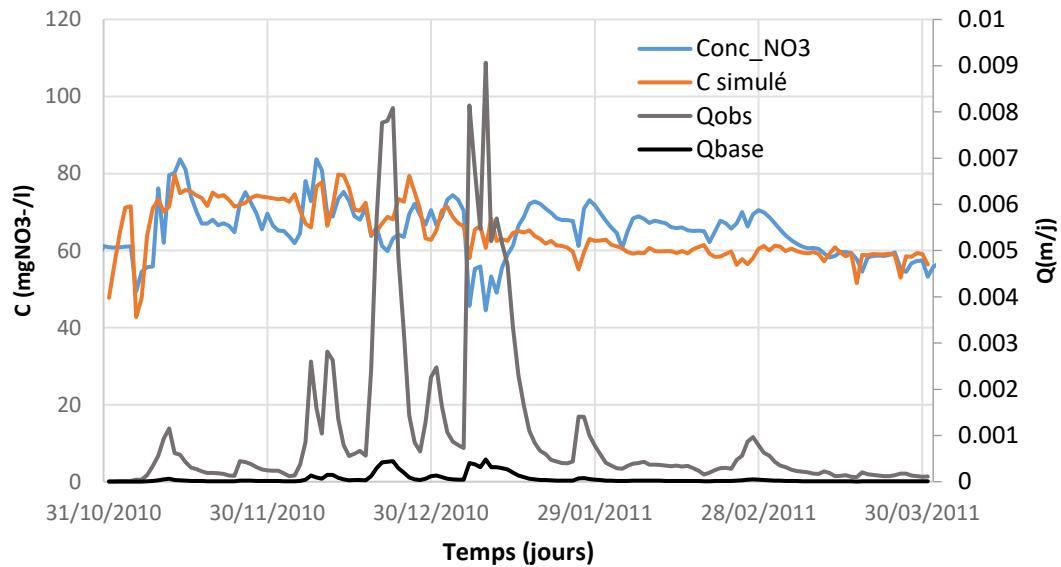


Figure 22: Zoom sur les concentrations en nitrate simulées durant la saison de drainage intense 2010/2011

#### II.1.4.2.4 Transfert des nitrates dans trois réservoirs en série

Dans la continuité de l'approche précédente, nous rajoutons un 3<sup>ème</sup> réservoir tampon  $R_t$ , placé entre les deux réservoirs  $R_s$  et  $R_p$  (Figure 15d). Ceci dans l'idée de moduler les flux de nitrate transitant par le réservoir proche de l'interdrain. Le débit total  $Q_T$  sera décomposé en trois parties en utilisant les coefficients  $i, j$  et  $k$ , considérés comme des paramètres de calage sachant que  $i + j + k = 1$ .

$$\begin{aligned}
 Q_{RS} &= i * Q_1 + j * Q_2 + k * Q_3 \\
 Q_{Rt} &= i * Q_1 + j * Q_2 \\
 Q_{Rp} &= i * Q_1
 \end{aligned}
 \tag{II.17}$$

Les flux sortants du réservoir proche du drain  $F_{sur}$ , tampon  $F_{tm}$  et proche de l'interdrain  $F_0$  sont calculés à l'aide des équations de transfert exponentielles.

$$\begin{aligned}
Fsur_t &= Fin_t^{Rs} \left( 1 - \exp\left(-\frac{Q_{Rs}(t)}{vl_1}\right) \right) \\
Ftm_t &= Fin_t^{Rt} \left( 1 - \exp\left(-\frac{Q_{Rt}(t)}{vl_2}\right) \right) \\
F0_t &= Fin_t^{Rp} \left( 1 - \exp\left(-\frac{Q_{Rp}(t)}{vl_3}\right) \right)
\end{aligned}
\tag{II.18}$$

Les Tableau 6 et Tableau 7 regroupent respectivement les valeurs ajustées des paramètres et des valeurs estimées de REH suite au calage des données de concentration en nitrate en se basant sur le critère objectif de Nash (NSE).

Tableau 6: Les paramètres ajustés avec l'approche à trois réservoirs en série

<i>i</i>	0.5
<i>j</i>	0.33
<i>k</i>	0.17
<i>vl</i> <sub>1</sub>	0.00004
<i>vl</i> <sub>2</sub>	0.0006
<i>vl</i> <sub>3</sub>	0.34

Tableau 7: Comparaison des valeurs de REH mesurées et estimées en se basant sur l'approche à trois réservoirs en série

Année hydrologique	REH estimé	REH mesuré
2008-2009	100.34	49.4
2009-2010	118.36	88.9
2010-2011	120	73
2011-2012	99.52	81.3

*vl*<sub>1</sub>, *vl*<sub>2</sub> et *vl*<sub>3</sub> sont des paramètres qui caractérisent respectivement les volumes de lessivage des trois réservoirs : proche du drain, tampon et proche de l'interdrain, respectivement. Les fonctions de transfert des nitrates (équation II.18) et les bilans de masse sont les mêmes que ceux utilisées dans l'approche à deux réservoirs en série (équations II.15 et II.16). A chaque pas de temps, le réservoir tampon reçoit et emmagasine le flux sortant du réservoir proche de l'interdrain puis à l'aide de la fonction de transfert exponentielle, définie par un volume de lessivage *vl*<sub>2</sub>, un flux de nitrate est évacué vers le réservoir proche du drain.

Comme pour l'approche à deux réservoirs en série, les REH ont tendance à être systématiquement surestimés. Cependant, la corrélation entre les REH simulés et mesurés qui résulte de l'approche à deux réservoirs en série est moins marquée. Cela en est de même pour les concentrations simulées. Nous pouvons noter, tout de même, que l'évolution saisonnière est bien respectée (Figure 23). Néanmoins, nous remarquons un décalage temporel entre les simulations et les observations de concentration en nitrate et une mauvaise conceptualisation de la dynamique de transfert événementielle. Dès lors, une étude supplémentaire est nécessaire afin de mettre en avant le rôle prépondérant du réservoir tampon dans la modélisation des concentrations en nitrate aux deux échelles : événementielle et saisonnière.

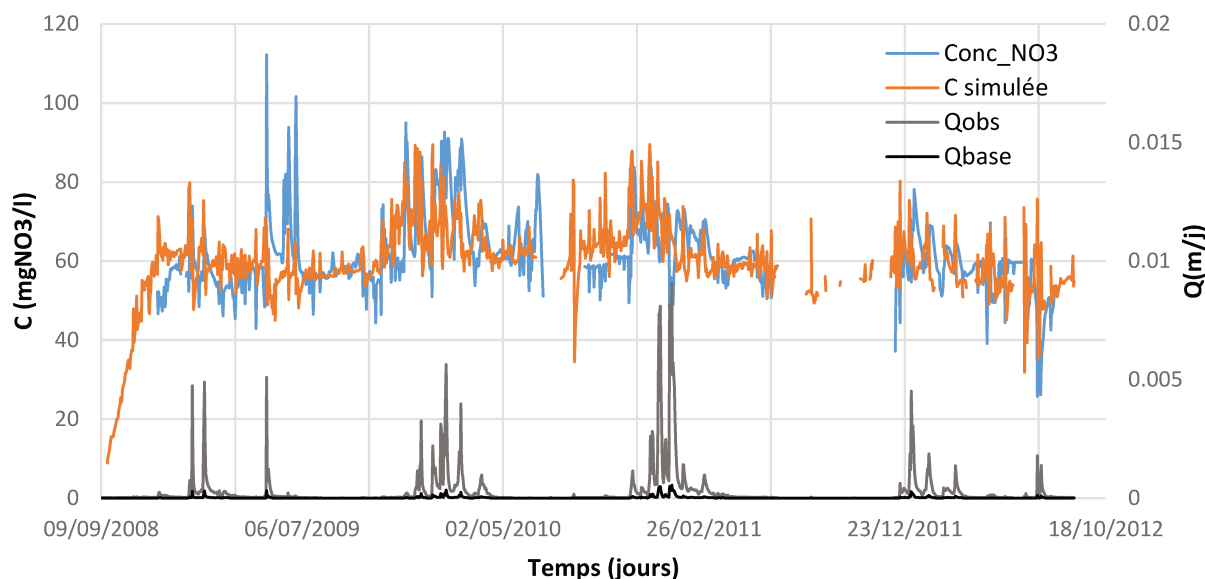


Figure 23: Les concentrations en nitrate simulées en utilisant l'approche à trois réservoirs en série

### II.1.5 Bilan des tests de performance sur les quatre approches de modélisation

Nous avons présenté dans ce chapitre les étapes de développement du modèle nitrate conçu pour simuler les flux et les concentrations en nitrate au pas de temps journalier. En effet, le modèle de type conceptuel est applicable sur des sols agricoles artificiellement drainés par des tuyaux enterrés. Le modèle nitrate requière la disponibilité des données de débit de drainage. Nous avons testé nos quatre approches conceptuelles de modélisation à l'échelle du groupe de parcelles agricoles de Chantemerle. Les observations journalières du débit de drainage ont été considérées comme des données d'entrée du modèle nitrate. A terme, la version finale du modèle de transfert des nitrates devrait permettre l'intégration systématique des débits de drainage simulés issues d'un modèle de drainage agricole.

La première configuration a été construite à partir d'un cas simple de modélisation à un seul réservoir. Puis, nous avons amélioré les performances en conceptualisant l'espace compris entre le drain et l'interdrain en un ensemble de réservoirs connectés en parallèle ou en série. Ces derniers permettent à la fois d'intégrer l'information sur le stock d'azote total disponible pour la lixiviation et le volume de lessivage des nitrates. Une mise à jour annuelle et systématique du stock d'azote doit être effectuée au début de chaque saison de drainage. La fonction exponentielle développée par Magesan et al. (1994) puis décrite par Arlot (1999) est utilisée pour transférer le stock d'azote disponible vers le drain.

Les résultats obtenus suivant l'approche à un seul réservoir montrent une évolution saisonnière correcte des concentrations en nitrate simulées. Par contre, la dynamique événementielle n'est pas bien représentée. La conceptualisation du sol drainé à partir d'une décomposition en deux

réservoirs empilés en parallèle n'a pas été concluante car le compartiment superficiel a été contourné et le flux passait uniquement à travers le compartiment profond.

Nous avons montré que l'approche de modélisation du transfert des nitrates dans un sol artificiellement drainé (groupe de parcelles agricoles) est prometteuse. L'approche qui donne le meilleur résultat en termes de simulation des concentrations en nitrate correspond à celle où l'espace compris entre le drain et l'interdrain est décomposé en deux réservoirs interconnectés et empilés en série. Ces performances peuvent être améliorées en considérant l'hétérogénéité des transferts présente dans les sols drainés. En effet, les vitesses d'écoulement de l'eau et du nitrate est importante dans la partie du sol proche du drain. Cela est dû au gradient de pression hydraulique généré par la présence du drain mais aussi par la macroporosité existante au-dessus du drain. Ces macroporosités sont à l'origine des écoulements préférentiels qui ont été décrites à plusieurs reprises dans la littérature pour modéliser le transfert des polluants en milieu agricole artificiellement drainé (Gerke and van Genuchten, 1993; Frey et al., 2016).

Dans le chapitre suivant, nous allons décrire la version finale du modèle nitrate qui s'inspire en grande partie des différentes approches de modélisation présentées dans ce chapitre. En plus des deux compartiments connectés en série qui permettent de considérer les écoulements horizontaux et lents, nous intégrerons le concept des écoulements préférentiels en définissant un compartiment responsable des transferts verticaux et rapides de nitrate en dessus du drain.

Finalement, nous avons remarqué que les flux de nitrate sont nettement mieux simulés que les concentrations. Cependant, nous construisons l'approche finale du modèle sur la base des données de concentrations en nitrate (voir chapitre II.2) qui sont plus sensibles aux variations du REH et plus faciles à acquérir sur le terrain.

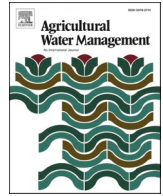
## **Chapitre II.2 : Le modèle NIT-DRAIN pour simuler les concentrations en nitrate et la lixiviation en parcelles agricoles artificiellement drainées**

---

Ce chapitre est rédigé sous forme d'article scientifique. Il a été accepté par la revue « Agricultural Water Management » le 23 juin 2022 et publié dans sa version définitive à la date du 1<sup>er</sup> septembre 2022.

Le document présente la version définitive du modèle NIT-DRAIN. Cela inclut :

- Une description détaillée de NIT-DRAIN ainsi que les hypothèses de fonctionnement du modèle.
- L'évaluation de la qualité des simulations des concentrations en nitrate en proposant à la fois le calage annuel et interannuel des paramètres d'entrée du modèle.
- L'étude de l'impact d'un remplacement des observations journalières des débits de drainage par des simulations (ex. calculées par SIDRA-RU) sur la qualité des sorties du modèle NIT-DRAIN (concentrations en nitrate).



# NIT-DRAIN model to simulate nitrate concentrations and leaching in a tile-drained agricultural field

Samy Chelil<sup>\*</sup>, Hocine Henine, Cedric Chaumont, Julien Tournebize

University of Paris-Saclay, INRAE Jouy-en-Josas - Antony, UR HYCAR, Antony, France

## ARTICLE INFO

### Keywords:

Nitrate modeling  
Nitrate concentrations  
Agricultural drainage  
Conceptual modeling  
Nitrate leaching  
Preferential flow

## ABSTRACT

Agricultural pollution, due to excessive land fertilization, affects the quality of both surface and ground water. This paper presents a conceptual and reservoir-based model that simulates the time variation of nitrate concentrations  $[\text{NO}_3^-]$  at the outlet of a subsurface drainage network, referred to herein as "NIT-DRAIN." The model is based on a simplified scheme of water and nitrate transfer processes by decomposing the soil profile located between the drain and the mid-drain into three interconnected and conceptual compartments. Hence, the fast transfer throughout the macroporosity located above the pipe is described by the first compartment while the low and residual nitrate transfers are managed by the two other compartments. The model assumes that all seasonal nitrogen transformations at the field scale lead to the remaining pool of nitrate available for leaching at the beginning of the winter season (RNBW). This variable is updated by the model at the beginning of each hydrological year. The NIT-DRAIN model requires two input data: the measured or simulated drainage discharge and the RNBW. Seven parameters were introduced to manage nitrate leaching and water flow through the three soil compartments using two different transfer functions. The calibration and validation step (C/V) was performed to assess the performance of the model in reproducing the nitrate concentration observations acquired at Rampillon (355 ha, data for 6 years), located east of Paris, France. The results showed performance criteria of KGE greater than 0.5 and of RMSE less than  $5 \text{ mgNO}_3^-/\text{l}$ , which confirm the ability of the model to simulate the observed nitrate concentrations with a good agreement. The annual model calibration framework, implemented to assess the parameter variability, confirms the model stability and consistency. However, the use of simulated drainage discharges as input underlines the need to reproduce with accuracy the earlier low discharge values by the drainage model. The innovative management of nitrate transfer through the conceptual compartments based on the annual update of the RNBW variable enables the simulation of the nitrate concentrations with a high performance using a limited number of input data. In addition, the periods of flushing and dilution are clearly identified by the NIT-DRAIN model thanks to the accurate estimation of the nitrate storage variation inside each model compartment.

## 1. Introduction

Nitrogen (N) is available in agricultural soils in different compositions. The one most easily assimilated by crops is the nitrate ion ( $\text{NO}_3^-$ ). Nitrate contributes to crop growth and to improved crop yield. Fertilizers, mainly composed of nitrate, are spread periodically over agricultural land to maintain the required quantity of nitrate for crop development. However, a considerable increase of nitrate leaching to rivers and aquifers leading to water resource pollution was observed when the amount of nitrate available in the soil exceeded the actual need of the crop (Agrawal et al., 1999; Almasri and Kaluarachchi, 2004; Billen

et al., 2013; Kumazawa, 2002; Lassaletta et al., 2014).

The practice of agricultural drainage through the installation of buried perforated pipes or open ditches is widely used in land suffering from frequent winter soil waterlogging in order to eliminate the excess of water. Thus, agricultural drainage aims to increase crop yields (Mohtadullah, 1990) and allows for better access to fields by farmers. Although this practice has existed for several thousands of years (Beauchamp and Pavelis, 1987), the installation of drainage networks has been greatly intensified in the last few decades. This may be linked to some negative aspects, such as the faster transfer of agricultural pollutants to the drain outlet (Schilling et al., 2012; Scholefield et al.,

<sup>\*</sup> Corresponding author.

E-mail address: [samy.chelil@inrae.fr](mailto:samy.chelil@inrae.fr) (S. Chelil).

<https://doi.org/10.1016/j.agwat.2022.107798>

Received 8 April 2022; Received in revised form 20 June 2022; Accepted 23 June 2022

Available online 2 July 2022

0378-3774/© 2022 Elsevier B.V. All rights reserved.

1993; Skaggs et al., 1994; Zhi and Li, 2020).

The reduction in pollutants leaching (e.g., nitrate) from agricultural drained lands has been supported by the European Water Framework Directive (DCE; (Directive, 1991)) since the beginning of the 21st century. Hence, several studies have been conducted around this topic. Dinnes et al. (2002) suggested a set of strategies to mitigate nitrate leaching from agricultural drained soils, such as the use of controlled drainage and the optimization of “the timing–amount spread of fertilizers” by considering the N-turnover features and by testing the nitrogen availability of the soil prior to any fertilizer application (Magdoff et al., 1990). Furthermore, the Late-Spring Soil Nitrate Test (LSNT) could be useful for assessing the available quantity of nitrate and for reducing nitrate loss at the end of the spring season (Jaynes et al., 2004). The same approaches could be used to estimate the remaining quantity of nitrate pool in the soil for the autumn season. Typically at this period, cover crops are commonly not observed (bare soils), resulting in a greater potential for nitrate leaching after the first few rain events (Hansen and Djurhuus, 1996; Kirchmann et al., 2002). The use of winter cover crops can limit nitrate losses significantly (Meyer et al., 2020, 2018). From an agronomical standpoint, Bockstaller et al. (2021) have evaluated the potential of nitrate leaching, based on the cover crop concept and agronomical modeling. The latter requires the availability of crop rotation data and local measurements of nitrogen soil storage.

In this paper, the terminology “remaining pools of nitrate at the beginning of the winter season” (RNBW) refers to the potentially leachable quantity of nitrate initially trapped in the soil profile (between the topsoil and drains depth) at the beginning of each winter season. Compared with the LSNT, RNBW field sampling has an environmental focus rather than an economic one (Salomez and Hofman, 2002). Therefore, a limited-frequency sampling of the RNBW, essentially due to the expensive acquisition fees, makes these data scarce most of the time (Clay et al., 1997). This fact has led to studies of the potential relationship between nitrate concentrations and surpluses (Arlot, 1999; Oenema et al., 1998) to allow for the estimation of the nitrate available for leaching based on nitrate concentration data.

In the past, several papers focused on tracer experimentations to describe solute transfer through shallow soil depths. Utermann et al. (1990) and Gaur et al. (2006) consider the existing vertical connection between the unsaturated and the saturated zones of the soil by using appropriate transfer functions, while Kohler et al. (2003) separate the subsurface soil into two conceptual compartments to describe the preferential and matrix flow paths. One can note that preferential flows occur near the drain location, while a residual matrix flow is a horizontal transitional flow between the mid-drain and the drain outlet. The decomposition of the solute movement over the agricultural drainage soil porosities and the consideration of the dual permeability modeling approach have been widely investigated by the research community (Frey et al., 2016; Gerke and Maximilian Köhne, 2004; Richard and Steenhuis, 1988). A set of modeling experiments have been conducted using the physically based HYDRUS-2D model (Simunek et al., 1999) to approach the solute transfer velocities between the soil surface and the drain outlet (Paris, 2004). Thus, a significant decrease in the solute travel time at the proximity of the tile drain has been noticed, suggesting the necessity to consider both preferential and residual soil matrix flows. Kjær et al. (2011) observed similar solute transport pathways when the chloride tracer experiment was conducted on a 1.26 ha tile-drained agricultural area in Denmark. In addition, a relatively recent review by Jacobsen and Kjær (2007) indicates that rapid solute transport is observed when macropores are located near the drain outlet, noting that water flow pathways depend on hydraulic conditions and soil structure and proprieties as well.

Today, high-frequency nitrate concentration samplings (< 1 h) are carried out in order to ensure better monitoring and obtain more information on the intraday nitrate behavior. Such experiments require the use of automatic sensors providing up to sub-hourly chemographs (Burns et al., 2019; Liu et al., 2020), which could be expensive,

time-consuming, and involve at least one qualified operator. The use of water quality modeling might represent an alternative way to simulate the substantial lack of data (e.g., soil nitrate concentrations) or to estimate the temporal variation of the soil nitrate pool.

Different modeling approaches are described in the literature (Payraudeau, 2002). Conceptual water quality modeling is commonly considered as a simplification of the existing and complex physical and biogeochemical processes that need advanced knowledge on the interaction between the different ecosystem components. By contrast, process-based models require a large dataset to operate due to the consideration of complex nutrient interactions and transfer processes through multiple soil layers. Moriasi et al. (2012) provide a detailed technical description of 25 hydrologic and water quality models (e.g., simulated processes, spatial and temporal scale, open source code or not). One can identify process-based crop models taking into account the data on farming practices to estimate crop yield and nutrient exportations. The biogeochemical DNDC model (Li et al., 1992a; b) enables the estimation of carbon sequestration and nitrogen denitrification, while a newly updated version of this model includes a better description of the drainage hydrology (Smith et al., 2020). An objective comparison of RZWQM2 (Ma et al., 2012) and DNDC modeling predictive performances indicates that RZWQM2 is more suitable for greenhouse gas emissions and water continent simulations (Jiang et al., 2020). One can note the STICS model (Brisson et al., 2003), which is decomposed on a set of modules managing crop growth, soil water, and nitrogen balances based on climatic and agronomic input data. A recent application of STICS using 34 years of experimental data (collected at the *Fagnières site* in France) confirms its satisfactory performance in simulating the nitrate flux (Yin et al., 2020). Moreover, Tournebize et al. (2004) adapted the STICS model to consider the subsurface drainage modeling.

Accordingly, process-based models (e.g., DNDC, STICS) require a large number of data (crop data in particular). Puech et al. (2020) propose the spatial distribution of crop data at the regional scale; however, the scarcity of such data at a large scale could be considered a hindrance to wider uses. In addition, the dynamic assessment of the amount of potentially leachable nutrients toward groundwater and rivers is often poorly described. Finally, the statistically based model “Nutting-N” enables a good estimation of nitrate loads and eutrophication risk using a limited number of input data (Dupas et al., 2013, 2015), while detailed local model inputs are, however, needed to enhance the performance of the regionalized model.

Semi-distributed hydrological models taking into account drainage and water quality processes, such as HYPE (Lindström et al., 2010) or SWAT (G. Arnold et al., 2012), make it possible to simulate nitrate losses with a good performance. However, they still require the introduction of spatially distributed data, which are difficult to collect for most application cases. Other modeling approaches focused on the identification of the concentration–flow (C–Q) relationship either at one rainfall event or at the seasonal scale using empirical equations (Arlot, 1999; Liu et al., 2020; Tunqui Neira et al., 2020). The C–Q relationship is difficult to handle for the whole nitrate leaching cycle including both flushing and dilution patterns.

Agricultural subsurface drainage models are specifically developed to design drainage networks and to enhance the comprehension and the assessment of both drainage discharge behavior and nutrient transport. The DRAINMOD-NII process-based model is based on the water balance calculation to simulate the drainage discharge, and it uses the most important components of the nitrogen cycle to predict nitrogen dynamics and turnover (Youssef et al., 2005; Skaggs et al., 2012). The process-based model ADAPT (Gowda et al., 2012), which considers the macropore flow transfer, is derived from the combination of the drainage model DRAINMOD (Skaggs et al., 2012) and the water quality model GLEAMS (Leonard et al., 1987). Both the DRAINMOD-NII and the ADAPT models performances have been investigated by Ale et al. (2013). The two models show very similar performances in terms of water and nitrate leaching simulation under large time steps (e.g.,



months and years). Arlot (1999) noted the complexity of the interaction between biogeochemical and hydraulic processes, assuming that biogeochemical interactions can be neglected in winter due to the low soil temperatures (e.g.,  $< 8^{\circ}\text{C}$  in the north of France). Hence, Arlot (1999) has proposed the use of hydraulic processes, including essentially the nitrate transfer pathway and velocity through the soil porosities to simulate nitrate leaching in the agricultural drainage context.

Selecting the appropriate model depends on the study purpose, on input data availability, and on computing resources. The choice of model can be a tricky and complex task in some cases. End-users may look at some objective indicators to guide their choice, including the identification of the nature and the availability of the model inputs, simulation efficiency, and model parsimony (Perrin et al., 2001). Moreover, developing parsimonious water quality models can become a difficult task. Hence, the use of a stepwise prioritization approach might lead to the simplification of some complex physical processes, as indicated by Tang et al. (2019).

The main objective of this study is to develop and validate a new conceptual nitrate model applied in the context of agricultural subsurface drainage. The modeling approach considers the flushing and dilution patterns using the nitrate data at hourly and daily time steps. The model structure takes into account: (1) the preferential flow transfer, which describes fast and vertical nitrate infiltration above the drain location and (2) the soil matrix flow highlighting the residual low and lateral nitrate transfer achieved between the mid-drain and the drain location. In addition to the non-consideration of the N-turnover processes (Arlot, 1999), we assume that the major components of the nitrogen cycle might be gathered in one annual input variable (RNBW). The model requires a limited number of input data and parameters. First, the model is validated based on hourly-observed drainage discharge data. Second, the nitrate concentration error, resulting from the use of daily drainage discharge simulations (i.e., derived from a validated drainage model) instead of observations inputs, is assessed accordingly.

## 2. Study site and experimental data

The experimental set-up is in the Rampillon catchment (355 ha), located upstream of the Ancœur agricultural catchment (132.2 km<sup>2</sup>), 70 km southeast of Paris, France (03°03'37.300E, 48°32'16.700 N) (Fig. 1).

The soil is mainly of luvisol type (Mander et al., 2021; Tournebize et al., 2012) and lies on a shallow impermeable layer due to the clay accumulation, typical of French waterlogging soils. These two conditions support the presence of a shallow water table, which affects crop growth by reducing the yield and the quality of the harvest. Both a large part of the Ancœur catchment ( $> 80\%$ ) and the whole Rampillon area have been subsurface drained since 1980 to prevent frequent winter soil saturation (Tournebize et al., 2012). The drainage network consists of perforated PVC pipes, spaced 10 m apart and buried at about 90 cm deep, allowing for better soil tillage and a satisfactory crop yield.

It is noteworthy that 98% of the total area is tilled mainly following the crop rotation: winter wheat, sugar beet, corn, beans, and rape (Fig. 2). Thus, one can distinguish winter crops (e.g., winter wheat, winter barley, and rape) from spring crops (e.g., corn, sugar beet, beans). The winter wheat and barley are generally sown in October and harvested in early July, while corn is sown in April and harvested in October. In this agricultural setup, using catch crops could be very helpful in limiting excessive nitrate leaching (Meyer et al., 2018).

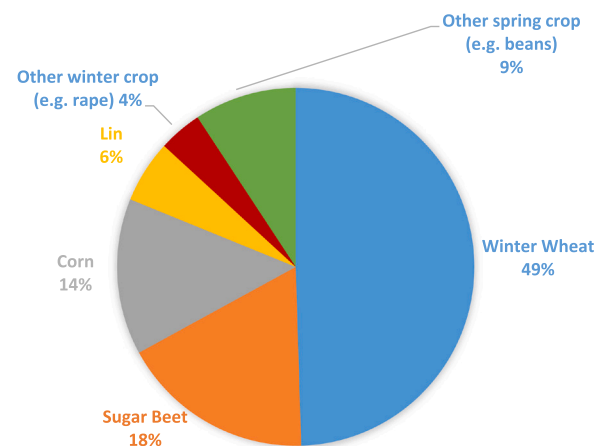


Fig. 2. The mean ratio of crops farmed at Rampillon parcels between 2013 and 2019.

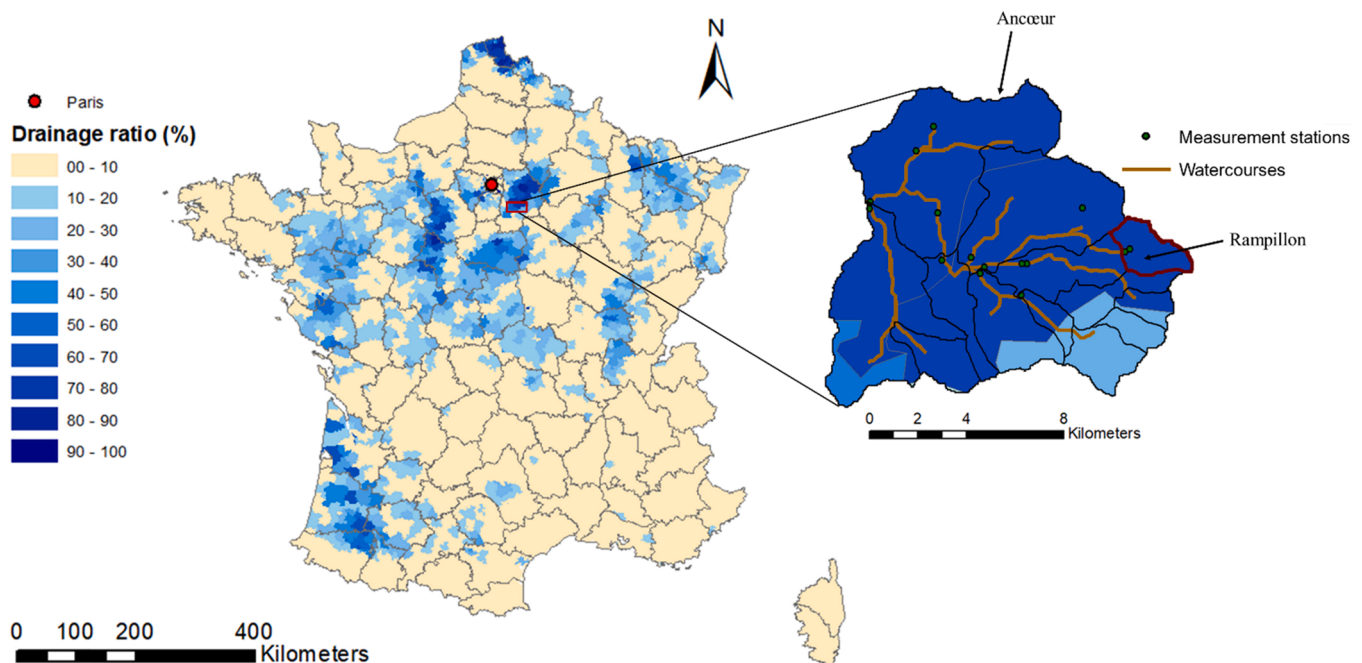


Fig. 1. Rampillon sub-catchment location (03°03'37.3' E, 48°32'16.7' N, 70 km southeast of Paris, France).

On average 150 kgN/year of mineral fertilizer is applied three times: end of February, end of May, and end of June. The average values of corn and wheat yield reported between 2013 and 2017 by *AGRESTE* survey are of 9.7 t/ha and 8.3 t/ha, respectively (<https://agreste.agriculture.gouv.fr/>). Four seasons are available in the studied region, including a winter marked by relatively low temperatures ( $T \approx 3$  °C). The local climate is oceanic and temperate with a mean annual temperature and rainfall of 10.5 °C and 689 mm, respectively.

The Rampillon experimental set-up consists of a continuous measurement of subsurface drainage discharge and water quality parameters at the catchment outlet. A Doppler flowmeter (Sigma 950, Hach) was installed to record hourly drainage discharge values and a multiparameter spectrophotometer (Spectrolyser UV-vis, S::can) was implemented for hourly measurements of nitrate concentrations. Rainfall data were obtained by means of a local pluviometer installed at the study site. The potential evapotranspiration (PET) data are extracted from the SAFRAN database (Vidal et al., 2010) at the daily time step. PET data values are calculated following the Penman–Monteith formula and converted into hourly time steps using a Gaussian distribution with 12 p. m. at the top and 6 a.m. at the bottom. The nitrogen soil metrics are extracted from the annual dashboard, which is provided by *AquiBrie* (<https://www.aquibrie.fr/publications/tableau-de-bord-2016–2017>). The local field sampling of the soil profile using a soil auger was conducted between 2014 and 2018 at the end of the autumn season in order to measure the remaining nitrogen pools (RNBW). In fact, nitrate storage in the study soils covers several agricultural parcels and crop turnover at the scale of the *Seine-et-Marne* department (5915 km<sup>2</sup>). Thus, the mean RNBW values are obtained by surface weighting the local measured values for typical crop plots.

A summary of the 6 years of data collected between 2014 and 2020 at the Rampillon experimental set-up is presented in Table 1. One can distinguish 2017–2018 as a wet season with more than 900 mm of rainfall that generates 485 mm of cumulative drained water. The 2016/2017 season was typically dry with less than 90 mm of cumulative drained water. Thus, a low quantity of drained water in this dry year shows a high average nitrate concentration. This contrast in terms of weather supports the reliability of our study. The yearly mean surface weighted values of RNBW range between 49 and 78 kgN.ha<sup>-1</sup>.year<sup>-1</sup>.

Generally, the main nitrate flux exportations are observed during the winter months (i.e., between September and February). According to Kladviko et al. (1991) and depending on the spring rainfall amount, the part of the nitrate flux observed from March to September does not go beyond 10% of the total cumulative exportations. In addition, low temperatures are observed during the winter season, which tends to limit the impact of the nitrate processes other than leaching. Thus, only data extracted between September and February are included to simulate nitrate concentrations.

### 3. Model description

The NIT-DRAIN model (NITrate DRAINage) aims to simulate nitrate concentrations at the scale of subsurface drainage parcels, collecting

**Table 1**  
Summary of Rampillon experimental set-up data.<sup>1</sup>

Hydrological season (Sep-Aug)	Rainfall (mm)	PET (mm)	D (mm)	Measured nitrate flux (kgN.ha <sup>-1</sup> .year <sup>-1</sup> )	Mean measured nitrate concentrations (mgNO <sub>3</sub> .l <sup>-1</sup> )	RNBW surface-weighted values (kgN. ha <sup>-1</sup> .year <sup>-1</sup> )
2014–2015	651	794	192	24.1	55.6	49
2015–2016	868	687	171	29.1	64.8	72
2016–2017	692	696	89	14.8	74.1	78
2017–2018	917	737	485	54.6	49.8	66
2018–2019	686	794	160	27.4	75.8	–
2019–2020	752	713	169	15.1	49.3	–

<sup>1</sup> 2019–2020 data extends from September 2019 to July 2020

water from one or several agricultural fields. Based on global and conceptual approaches, the model is driven by a set of assumptions:

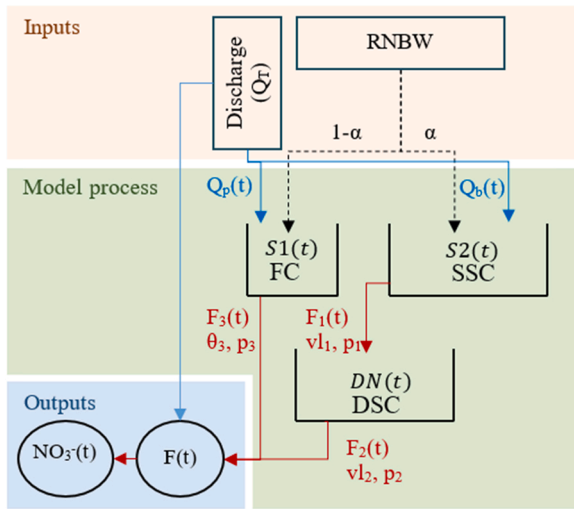
1. RNBW values are estimated by the model to approximate the initial quantity of nitrate available for leaching at the beginning of the winter season.
2. All biogeochemical processes affecting N-turnover are neglected due to the low temperatures in the winter season and a weak crop N uptake.
3. The high amount of nitrate exportations during the winter season (Kladviko et al., 1991) added to the significant impact of spring fertilizations on the nitrate balance during the spring season led us to consider only the winter period for nitrate simulations.
4. Nitrate removal processes inside drains are reduced to zero (low time of residence).
5. No deep N losses (pipes lying on an impervious layer) or surface runoff are considered (Henine et al., 2022).

The model is designed to be simple and robust with the use of a limited number of input data and parameters. The drainage discharge (decomposed on highflow and baseflow) is used as model input. Three conceptual reservoirs, interconnected by three transfer functions, are implemented to describe the water and nitrate transfer in the soil profile, extending between the drain and the mid-drain. The modeling approach highlights the nitrate flushing and dilution patterns through the consideration of contrasting nitrate transfer velocities (i.e., fast and slow transfers). More details on the model approach and structure are described in the sections that follow.

#### 3.1. Conceptual soil reservoirs

The reservoir-based approach, used in the NIT-DRAIN model, is derived from the PESTDRAIN and TAMMODEL modeling concepts (Branger et al., 2009; Steenhuis et al., 1997). Here, a similar modeling approach is adopted to estimate and assess the dynamic of the nitrate leaching from drained soil profiles. Thus, one can consider three conceptual reservoirs to describe the nitrate transfer in the soil using specific transfer functions: F<sub>1</sub>, F<sub>2</sub> and F<sub>3</sub> (Fig. 3).

The first and the second reservoirs (i.e., superficial slow compartment overlaid deep slow compartment, referred to as “SSC” and “DSC,” respectively) describe the slow solute transfer (Kjær et al., 2011; Paris, 2004). The third conceptual reservoir (i.e., the fast compartment, referred to as “FC”) is designed to describe the fast solute transfer occurring above the drain, mainly through preferential flows. RNBW is considered as an input variable and its amount is updated at the beginning of each hydrological year. The RNBW value is split using the parameter “ $\alpha$ ” between the FC and the SSC, as follows:



**Fig. 3.** Structure of the NIT-DRAIN model.  $F_1$  is the exported nitrate flux,  $v_1$  is transfer velocities,  $p_1$  accounts for regulation factors,  $\theta_3$  for the water content at field capacity.  $Q_p$  and  $Q_b$  are, respectively, highflow and baseflow. FC corresponds to the fast compartment, SSC and DSC, respectively, to the superficial and deep slow compartments.  $DN(t)$  corresponds to the variation of nitrate contained in the (DSC) compartment. The initial value of  $DN(0)$  is reset to 0 at the beginning of each hydrological season.

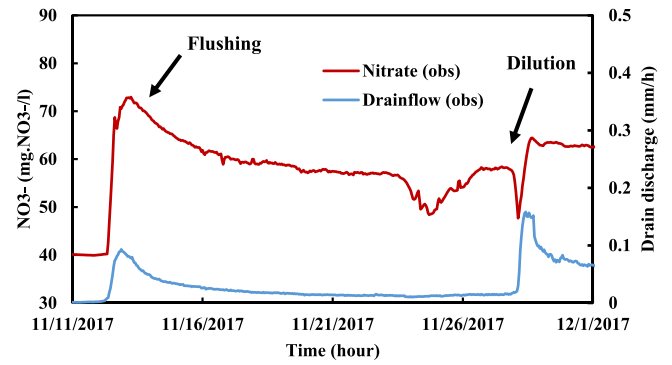
$$\left\{ \begin{array}{l} RNBW = S1(0) + S2(0) \\ S1(0) = (1 - \alpha) * RNBW \\ S2(0) = (\alpha) * RNBW \\ \alpha \in ]0, 1[ \end{array} \right\} \quad (1)$$

where  $S1(0)$  and  $S2(0)$  are, respectively, the initial amount of leachable nitrate contained inside compartments FC and SSC at the beginning of each hydrological season.

### 3.2. Consideration of the flushing/dilution patterns

Several studies and review papers have described and identified the nitrate flushing and dilution patterns at either seasonal or storm event scales (Arlot, 1999; Burns et al., 2019; Minaudo et al., 2019; Ruiz et al., 2002). The methods involved highlight the existing link between the discharge and the concentration of pollutants using transfer functions (Burns, 1974; Magesan et al., 1994; Unnikrishna et al., 1995) or by considering C-Q relationship (Liu et al., 2021; Minaudo et al., 2019). These approaches describe the correct simulation of nitrate concentrations at the scale of one rainfall event. However, there are very scarce models that can correctly simulate both the event and the seasonal flushing/dilution patterns of nitrate concentrations. Moreover, existing models involve the use of a large number of parameters and low-frequency observations data, which potentially limit the identification of the extreme variations of nitrate concentrations occurring at small timeframes.

The flushing pattern process represents the abrupt increase of nitrate concentrations during a flooding event (Fig. 4). This behavior is observed at the beginning of the drainage season (i.e., following the first drainage discharge events). The high nitrate quantity available on shallow soil depths during this specific period of the year is related to its previous post-harvest accumulation. The latter is mostly due to the increase in nitrogen mineralization following high temperatures and the absence of a potential catch crop during the summer season. The dilution pattern process generally occurs when a flooding event generates a



**Fig. 4.** Typical nitrate flushing/dilution events; the red line refers to the observed nitrate; observed drain flows are plotted in blue. Data are collected from Rampillon field (France).

decrease in nitrate concentrations (Fig. 4). Although concentrations are lower, dilution patterns are usually presented following the leaching of a large part of nitrate (i.e., initially trapped in the top soil layers at the beginning of the drainage season or after significant fertilizer applications).

Hence, flushing patterns are mainly provided by the compartment (FC) at the beginning of the drainage season describing fast nitrate transfer velocities where dilution patterns are essentially managed by compartments (SSC and DSC) characterizing slow nitrate transfer velocities.

### 3.3. Flow decomposition to consider the slow and fast nitrate transfers

Several research results indicate the significant contribution of the baseflow to the annual nitrate flux exportation (Jordan et al., 1997; Schilling and Zhang, 2004; Schilling et al., 2012; Spahr et al., 2010). The NIT-DRAIN model considers the distribution of the nitrate transfer velocities between the drain and the mid-drain by decomposing the drainage discharge data simulated or observed at the drain outlet into two parts. Hence, one can consider the baseflow separation techniques, such as the one proposed by Eckhardt (2005).

Hereinafter, the simplified linear formula (Eq. (2)) is used to separate the total drainage discharge value. We assume that the baseflow ( $Q_b$ ) drives the nitrate transfer from the superficial and deep slow soil reservoirs (SSC) and (DSC), respectively, whereas the highflow ( $Q_p$ ) describes the nitrate transfer from the fast soil reservoir (FC).

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_T(t) = Q_p(t) + Q_b(t) \\ Q_p(t) = (1 - \beta) * Q_T(t) \\ Q_b(t) = \beta * Q_T(t) \end{array} \right\} \quad (2)$$

where  $\beta$  and  $(1 - \beta)$  terms represent the parts of the drainage discharge moving through the slow compartments (i.e., SSC, DSC) and the fast compartment (FC), respectively. The empirical  $\beta$  parameter is fixed to 0.33 after testing several value combinations, which means that the baseflow part is assumed to constitute one third of the total drainage discharge.

### 3.4. Description of the model transfer functions

The quantity of nitrates transferred through subsurface drained soils depends on both the water flow and the nitrate available for leaching at different soil layers (Arlot, 1999). Otherwise, water flow in the soil enables the mobilization and the transfer of nitrate through the soil porosity toward the drain outlet. The solute movement and redistribution through the different soil compartments could be described using

appropriate transfer functions. Burns's transfer function (Eq. (3).a) facilitates the prediction of nitrate leaching by assuming a uniform initial distribution of nitrate quantity on a given soil profile (Burns, 1974, 1975, 1976). This function is generally applied to describe vertical solute transfers in soils. The latter has been implemented in the 1D LIXIM model (Mary et al., 1999) to predict the nitrate mineralization in bare soils. Hence, Burns's equation has been applied for wet drained soils showing preferential flow. Moreover, the PESTDRAIN model (Branger et al., 2009) considers the exponential transfer function (Eq. (3).b) described in Magesan et al. (1994) and derived by Jury and Roth (1990). In addition, the exponential formulation is known as the most adapted transfer function for modeling the subsurface drained flow according to Arlot (1999).

The NIT-DRAIN model considers both the Burns and the Magesan leaching functions, illustrated by Eq. (3) (a) and (b), respectively, to simulate the nitrate transfer from the three conceptual reservoirs to the drain outlet. Hence, Burns's function characterizes preferential nitrate transfers from the FC reservoir to the drain, while the exponential function describes the lateral nitrate transfer in soil, first from the SSC to the DSC reservoir and then from the DSC to the drain outlet.

$$X_l = \left( \frac{D}{D + \theta_{fc}/100} \right)^z \quad (a)$$

$$X_l = \frac{\theta_l}{\theta_0} \left( 1 - \exp\left(-\frac{D}{z\theta_l}\right) \right) \quad (b)$$
(3)

where  $X_l$  represents the fraction of solute leached below the soil layer depth  $z$ .  $\theta_{fc}$ ,  $\theta_l$  and  $\theta_0$  are, respectively, the volumetric water content at field capacity, the leaching porosity, and the initial volumetric water content.

In Eq. (3),  $D$  corresponds to the cumulative drained water volume expressed in the steady-state regime. Given the small model time step (hours, days), we suppose that flow rates  $Q_b(t)$  and  $Q_p(t)$  correspond to a succession of steady-state flow that form the transient flow regime (Branger et al., 2009). These two equations are then adapted to define the leaching functions  $F_1$ ,  $F_2$ , and  $F_3$  (Eqs. (4), (5), and (6)). The latter calculates the nitrate flux transferred from the SSC, DSC, and FC compartments, respectively.

$$F_1(t) = S2(t) * p_1 \left( 1 - \exp\left(\frac{Q_b(t)}{v l_1}\right) \right) \quad (4)$$

$$F_2(t) = DN(t) * p_2 \left( 1 - \exp\left(\frac{Q_b(t)}{v l_2}\right) \right) \quad (5)$$

$$F_3(t) = S1(t) * \left( \frac{Q_p(t)}{Q_p(t) + \theta} \right)^{p_3} \quad (6)$$

In Eqs. (4) and (5), we introduce  $v l_1 = z_1 \theta_l$  and  $v l_2 = z_2 \theta_l$  as the part of soil porosity contributing to nitrate transfer from the SSC and DSC compartments, respectively.  $p_1$  and  $p_2$  consist of weighting coefficients used to modulate the quantity of nitrate exported from the SSC and DSC, respectively;  $z_1$ ,  $z_2$ , and  $p_3$  from Eq. (6) describe the soil depth related to reservoirs SSC, DSC, and FC, respectively.  $S1(t)$ ,  $S2(t)$ , and  $DN(t)$  constitute the temporal evolution of the nitrate quantity stored in the FC, SSC, and DSC soil reservoirs, respectively.

Hence, the total exported nitrate flux  $F(t)$  at the time step  $t$  is calculated by the model as follows:

$$F(t) = F_2(t) + F_3(t) \quad (7)$$

Then, the nitrate concentration  $[NO_3^-]$  is calculated by dividing the total nitrate flux  $F(t)$  by the total drainage discharge  $Q_T(t)$ .

$$[NO_3^-] = \frac{F(t)}{Q_T(t)} \quad (8)$$

Nitrate mass balance is preserved by updating the quantity of nitrate at the time step  $(t + 1)$  for each soil reservoir (Eq. (9)).

$$\left\{ \begin{array}{l} S2(t+1) = S2(t) - F_1(t) \\ DN(t+1) = DN(t) + F_1(t) - F_2(t) \\ S1(t+1) = S1(t) - F_3(t) \end{array} \right\} \quad (9)$$

The state variables and the input parameters and variables of the nitrate model are listed in Table 2. In total, we can count seven input parameters to be calibrated and one input variable (RNBW) to be estimated.

#### 4. Model evaluation strategy

The validation of the new NIT-DRAIN model is based on the assessment of the nitrate concentration simulations against the available observations.

**Table 2**  
The NIT-DRAIN model variables and parameters.<sup>2</sup>

	Type	Parameter/ variable	Unit	Function/role	Time step	Bounds
Data	Input variables	$Q_p$	m/h	High-flow	hour	$[0, +\infty[$
		$Q_b$	m/h	Baseflow	hour	$[0, +\infty[$
		$Q_T$	m/h	Total flow	hour	$[0, +\infty[$
To be estimated		RNBW	kgN/ha/ year	Remaining pools of nitrate at the beginning of the winter season	year	$[0, 150[$
/	Initial value State variables	$DN(0)$	kgN/ha	Initial quantity of nitrate in the DSC compartment	–	0
		$DN(t)$	kgN/ha	Quantity of nitrate available in the deep/slow compartment (DSC)	hour	$[0, +\infty[$
		$S1(t)$	kgN/ha	Nitrate amount stocked inside FC	hour	$[0, 150[$
		$S2(t)$	kgN/ha	Nitrate amount stocked inside SSC	hour	$[0, 150[$
		$F_i(t)$	kgN/ha/h	Nitrate flux exported from each compartment	hour	$[0, +\infty[$
To be calibrated	Input parameters	$\alpha$	(-)	Sharing the RNBW between FC and SSC compartments	–	$]0, 1[$
		$v l_1$ and $v l_2$	m/h	The transfer velocities of nitrate from SSC and DSC compartments	–	$]0, +\infty[$
		$\theta$	m/h	Volumetric water content at field capacity	–	$]0, 0.1[$
		$p_1$ and $p_2$	(-)	Weighting coefficient used to modulate the quantity of nitrate exported from SSC and DSC	–	$]0, 10[$
		$p_3$	m	Soil layer coefficient	–	$[0.5, 1.5[$

<sup>2</sup> Estimated either by field measurement or by using inverse modeling

#### 4.1. Model calibration and validation

Three steps – *i*, *ii*, and *iii* – are considered in order to evaluate the model performance and the quality of the nitrate concentration simulations. For each step, the model parameters are calibrated using the GRG gradient and iterative descent algorithm (Lasdon et al., 1978). This algorithm searches for the optimal solution starting from arbitrary values of parameters. We note the annual RNBW value estimations using the same iterative approach.

*i*) Based on nitrate concentration observations, the model parameters and the RNBW values are optimized yearly in order to assess their stability and consistency. Each modeled hydrological period begins in September and ends in February of the next year. In all, six parameter sets are calibrated corresponding to the 6 years of data. Hence, the variability of the parameters indicates the degree of robustness of the model.

*ii*) The model evaluation is performed using the split-sample test (Klemeš, 1986) by dividing the whole of the observed data (Table 1) into two equivalent periods (P1 and P2). The period P1 corresponds to the three 3 years of data (2014–2017), while P2 covers the years between 2017 and 2020. For each period, the model is run in turns for both calibration and validation. We note the calibration of the model parameters based on the whole period of interest (2014–2020) for comparison purposes. In addition, RNBW values are specific to each hydrological year. Their values should be estimated accordingly on September 1st of each simulated year for both calibration and validation periods.

*iii*) The potential of the NIT-DRAIN model to perform using drainage discharge simulations instead of observations is investigated. Hence, the nitrate model will run under a daily time step to be in accordance with the daily drainage discharge outputs simulated by the selected agricultural drainage model. In this study, the simulated drainage discharges are derived from the SIDRA-RU model (Henine et al., 2022; Jeantet et al., 2021) as we plan to couple the two models (i.e., NIT-DRAIN and SIDRA-RU) in a future work. This step is included in order to provide a more detailed overview of the impact of discharge simulation mismatches on the quality of the nitrate simulations.

#### 4.2. Objective criteria

All parameters were estimated simultaneously using the well-known NSE objective criterion (Nash and Sutcliffe, 1970). The NSE values range from  $-\infty$  to 1 and require data on both simulated and observed nitrate concentrations (Eq. (10)). NSE value close to 1 indicates that the simulations are strongly fitted to the observations. In addition to NSE (used here as the principal performance criteria), the following metrics are calculated in order to consolidate the performance results obtained: the Kling–Gupta efficiency (KGE) criteria (Gupta et al., 2009), ranging from  $-\infty$  to 1 (Eq. (11)), and the root mean square error (RMSE) (Kenney and Keeping, 1962), ranging between 0 and  $+\infty$  (Eq. (12)).

$$NSE = 1 - \frac{\sum_{t=1}^{t=T} (X_t - X_t^*)^2}{\sum_{t=1}^{t=T} (X_t^* - \bar{X}_T^*)^2} \quad (10)$$

$$KGE = 1 - \sqrt{\left( \frac{\text{cov}(X_t^*, X_t)}{\sigma(X_t^*)^2 \sigma(X_t)^2} - 1 \right)^2 + \left( \frac{\bar{X}_T}{\bar{X}_T^*} - 1 \right)^2 + \left( \frac{\sigma(X_t)}{\sigma(X_t^*)} - 1 \right)^2} \quad (11)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{T} \sum_{t=1}^T (X_t - X_t^*)^2} \quad (12)$$

Where,  $X_t^*$  and  $X_t$  correspond to the observations and the simulations

at the time step  $t$ , respectively.  $\bar{X}_T^*$  and  $\bar{X}_T$  are defined as the mean values of the observations and the simulations, respectively, throughout the whole period of interest  $T$ . Note that  $\text{cov}(X_t^*, X_t)$  refers to the covariance between  $X_t^*$  and  $X_t$  while  $\sigma$  indicates the standard deviation.

Note also the use of relative  $\xi_{rel}$  and absolute  $\xi_{abs}$  error formulas (Eq. (13)) in order to describe the discrepancy between observations  $X^*$  and simulations  $X$  of, respectively, nitrate concentrations and discharge.

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_{abs} = |X - X^*| \\ \xi_{rel} = \frac{|X - X^*|}{X^*} \end{array} \right\} \quad (13)$$

Lastly, the coefficient of variation (CV) is calculated to assess the variability of the yearly-calibrated parameters. This statistical standardized index is obtained by dividing the standard deviation  $\sigma$  by the average value  $\mu$  of the parameter of interest.

$$CV = \frac{\sigma}{\mu} * 100 \quad (14)$$

## 5. Results

This section reports the simulation performance results obtained by the NIT-DRAIN model using three evaluation methods. First, the model calibration based on nitrate concentration observations is performed year per year over the entire dataset period in order to evaluate the annual variability of the model parameters. Then, the model is evaluated over a wider time scale using the split-sample test in order to check the efficiency and the robustness of the nitrate concentration simulations. Finally, the model performance is assessed using drainage discharge simulations as input data instead of observations.

### 5.1. Model assessment based on annual calibration

Annual model calibration based on hourly observations of nitrate concentrations is performed over the six hydrological years, ranging from September 1st, 2014 to February 5th, 2020. Fig. 5 shows the modeling behavior of nitrates for the 2017/2018 hydrological season. In (a) we compare the observed nitrate concentrations with the simulated nitrate concentrations. The flushing and dilution periods are separated by the vertical dashed line. In (b) we highlight the linear correlation between observed and simulated nitrate concentrations, showing a value of  $R^2 = 0.83$ . Based on Fig. 5.a and Fig. 5.b, one can note the well simulation of nitrate concentrations. In addition, the corresponding metrics listed in Table 3 (e.g., NSE = 0.83 and KGE = 0.86) objectively confirm the high quality of the model simulations. In (c) we illustrate the temporal nitrate exportations from the FC and DSC soil reservoirs, while the temporal evolution of the nitrate storage in each of the three conceptual reservoirs (i.e., FC, SSC, and DSC, Fig. 3) is presented in (d).

From Fig. 5a and d, we observe that the nitrate transfer switches from a flushing to a dilution pattern (i.e., separation by the dashed vertical lines) when the nitrate quantity stored in the DSC reservoir overtakes the one available in the FC reservoir. The change in the nitrate pattern may occur at the beginning of the intensive drainage season (IDS). Note that the IDS is reached when the soil profile is fully saturated by water (Lesaffre, 1988). Thus, the high quantity of nitrate, which is initially stored in the surface layer of the soil (i.e., corresponding to the FC reservoir in the model), is in large part exported by the first flows of the season. This pattern leads to the fast emptying of the FC conceptual soil reservoir, giving way to the gradual introduction of nitrate dilution phenomena headed by the deep slow soil reservoir (DSC). This behavior can be confirmed by the data in Fig. 5c where the significant nitrate exportations from the fast soil reservoir FC decrease with time, resulting in a gradual increase of nitrate exportations from the deep slow reservoir DSC. This result stresses the importance of preferential flows occurring above the drains after the first winter rainfall.

The annual calibrated parameters and the corresponding estimated

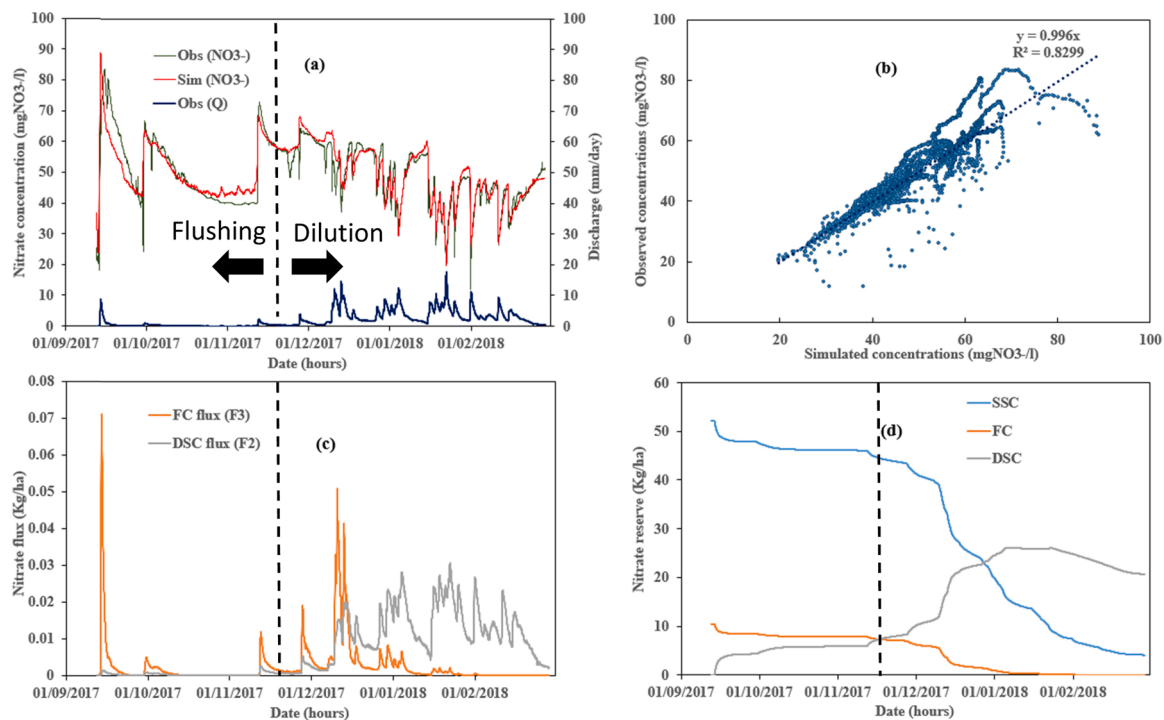


Fig. 5. Description of the nitrate modeling approach based on the 2017–2018 drainage season.

Table 3

Yearly calibrated parameters and their respective performances;  $|\Delta F|$  constitutes the absolute difference between simulated and observed cumulative nitrate exportations.

Year	RNBW (kgN/ha)	$ \Delta F $ (kgN/ha)	$\alpha$ (-)	$v_1$ (m/h)	$v_2$ (m/h)	$\theta$ (m/h)	$p_1$ (-)	$p_2$ (-)	$p_3$ (m)	NSE (-)	KGE (-)
2014/2015	85.7	0.1	0.64	0.760	4.92E-05	0.059	4.65	0.0012	1.16	0.74	0.84
2015/2016	52.4	0.0	0.95	0.050	1.50E-04	0.004	8.44	0.0016	1.18	0.91	0.95
2016/2017	105.0	0.1	0.61	0.361	2.38E-04	0.059	1.37	0.0050	1.15	0.82	0.88
2017/2018	62.8	0.6	0.83	0.377	7.43E-05	0.020	7.79	0.0012	1.14	0.83	0.86
2018/2019	80.8	0.0	0.93	0.300	3.69E-04	0.007	7.00	0.0052	1.24	0.52	0.45
2019/2020	65.0	0.1	0.97	0.001	9.72E-05	0.008	0.26	0.0006	1.07	0.82	0.90
$\sigma$	19.0	0.2	0.16	0.273	1.12E-04	0.025	3.44	0.0021	0.05	0.14	0.18
$\mu$	75.27	0.1	0.82	0.308	1.63E-04	0.026	4.92	0.0024	1.16	0.77	0.81
CV (%)	25.2	-	19.5	88.6	68.7	96.1	69.9	87.5	4.3	18.2	22.2

RNBW values are reported in Table 3 along with their respective NSE and KGE metrics. One can see that the  $p_3$  and  $\alpha$  parameters present the lowest values of CV (i.e., 4.3% and 19.5%, respectively). This result means that these two parameters did not show a high variability between seasons. Thus, the mean values of  $p_3$  and  $\alpha$  could be considered as references. The coefficient of variation related to the other parameters remains lower than 100%; however, such a degree of variability requires further advanced analysis (e.g., sensitivity analysis) to identify the impact of each parameter on the model response. We note that the wet and dry seasons (e.g., 2019/2020 and 2016/2017, respectively, Table 1) tend generally to show a contrasted values of  $\alpha$  (i.e., high and low values for wet and dry seasons, respectively).

The resulting performances indicated by means of NSE and KGE

indices confirm the high quality of the nitrate concentration simulation. In addition, the calculated mismatches between simulated and observed cumulative nitrate exportations, i.e.,  $|\Delta F|$ , get closer to zero for the overall calibrated years. The corresponding RMSE value remains less than  $0.06 \text{ kgN}\cdot\text{ha}^{-1}\cdot\text{year}^{-1}$ , which confirms the ability of the model to reproduce faithfully the observations.

### 5.2. Model assessment using the split-sample test approach

Two model calibration tests were carried out. The first test consists in calibrating the model parameters on the entire dataset period (i.e., 2014–2020) while the second consists in using the split-sample test (SST) to assess the robustness of simulations over the two equivalent

Table 4

Parameter and metric values resulting from the split-sample test and the global calibration test.

Validation test	Simulation period	Seasons	$\alpha$	$v_1$	$v_2$	$\theta$	$p_1$	$p_2$	$p_3$	NSE	KGE
a) Split Sample Test (SST)	Calibration P1	14–17	0.95	0.18	2.7E-04	0.007	9.78	0.0022	1.16	0.78	0.84
	Validation P2	17–20	-	-	-	-	-	-	-	0.44	0.53
	Calibration P2	17–20	0.89	0.28	9.0E-05	0.014	9.03	0.0009	1.15	0.75	0.79
	Validation P1	14–17	-	-	-	-	-	-	-	0.66	0.70
b) Full Sample Test (FST)	Calibration P1-P2	14–20	0.92	0.13	1.1E-04	0.010	5.75	0.0010	1.16	0.72	0.77

subperiods P1 (2014–2017) and P2 (2017–2020). This second test enables the consideration of the disparity and heterogeneity coming from the temporal variation of the discharge and nitrate data in drained agricultural soils. The two calibration tests are based on the hourly observations of nitrate concentrations at the drainage network outlet.

Table 4 combines the parameter sets and metric values resulting from both the SST model calibration and validation (a) and the full sample test (FST) calibration (b). The good model performance obtained from the two tests is noteworthy. The corresponding KGE and NSE values extend to 0.84 and 0.74, respectively, in the calibration period and up to 0.70 and 0.66, respectively, in the validation period. However, one can identify the relatively satisfactory KGE and NSE values for the P2 validation period. This short drop in performance could be mainly assigned to the data variability of period P1, which is much drier, as compared with P2. The KGE and NSE listed in Table 4 refer to the quality of the nitrate concentration simulations. In fact, nitrate flux simulations show a systematically high performance (e.g., NSE and KGE > 0.9). Thus, the model calibration and validation could be considered as successfully completed. A graphical comparison between simulated and observed nitrate concentrations in the periods P1 and P2 is presented in Figure A.1 and Figure A.2 (see the supplemental material section). The calibrated parameter values in P1, in P2, and in the total period remain robust and are comparable with those obtained by the annual calibration framework (Table 3).

RNBW values are estimated under the three model evaluation strategies (e.g., annual calibration, SST, and FST calibration; see section 4.1). It is important to note that one value of RNBW is estimated per season by the model. The bar graph presented in Fig. 6 indicates the six estimated RNBW values according to each calibration strategy carried out. The RNBW surface-weighted values, ranging from 49 to 78 kgN.ha<sup>-1</sup>.year<sup>-1</sup> (Table 1 and Fig. 6) remain consistent with the estimated values by the nitrate model (Fig. 6). Except for the 2014–2015 season, the RNBW measurements are close to the average of the estimations (i.e., less than 5kgN.ha<sup>-1</sup>.year<sup>-1</sup> of mismatch). The calculated RNBW values are of the same order regardless of the estimation approach. Some exceptions should be noted, such as the marked difference between the estimated RNBW values using annual calibration and those estimated using SST or global calibrations, i.e., underestimated for 2015–2016 and overestimated for the 2016–2017 dry season.

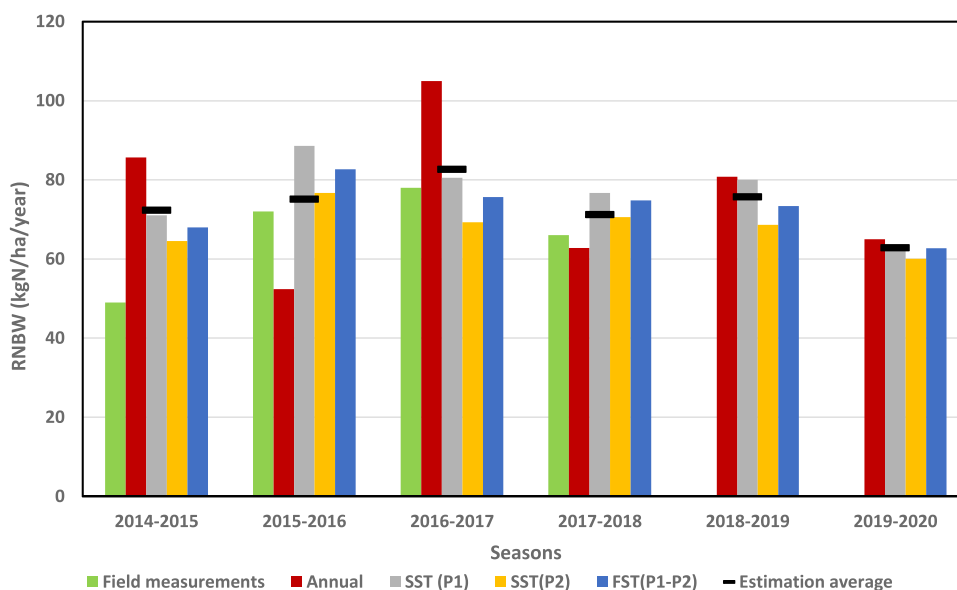


Fig. 6. Comparison of the RNBW field measurements (green bars) with those estimated by the model (i.e., red, blue, gray, and yellow bars result from annual, full sample test, and split-sample test in P1 and P2 sub-periods, respectively). The black horizontal lines indicate the mean values of the estimated RNBW.

Table 5

Metrics describing the quality of nitrate simulations using two sources of inputs (observed or simulated drainage discharge); daily simulations cover the total period of data (2014–2020).

Discharge source	Nitrate simulations	RMSE	NSE [-]	KGE [-]
Observations	Flux	0.03 kgN.ha <sup>-1</sup> .day <sup>-1</sup>	0.97	0.97
	Concentration	5.61 mg(NO <sub>3</sub> ).l <sup>-1</sup>	0.72	0.77
Simulations	Flux	0.13 kgN.ha <sup>-1</sup> .day <sup>-1</sup>	0.56	0.78
	Concentration	13.08 mg(NO <sub>3</sub> ).l <sup>-1</sup>	-0.61	0.34

### 5.3. Model assessment using simulated drainage discharge

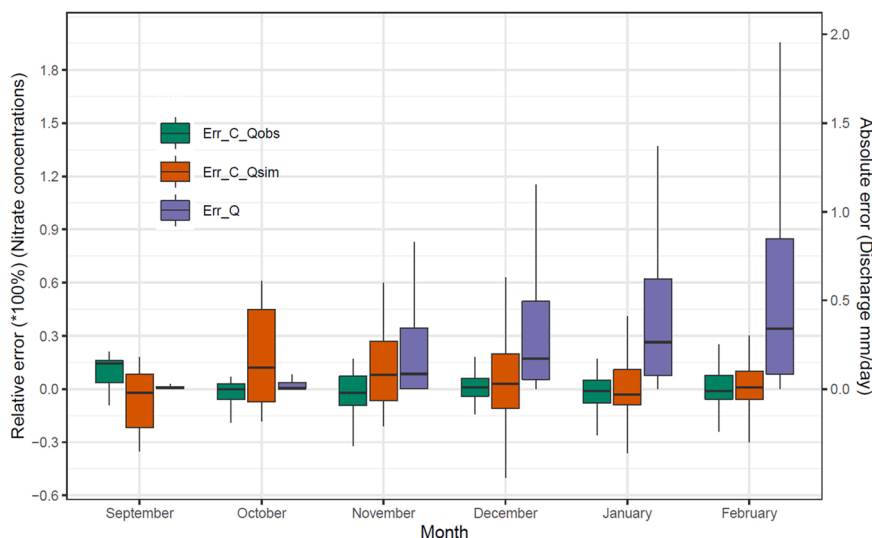
This section shows the impact of the discharge input source on the quality of the nitrate concentration simulations. We note the use of the NIT-DRAIN parameters calibrated over the entire period of data (see Section 5.2, Table 4, part b). Hence, we focus on the quantification of the error in nitrate simulations resulting from the use of simulated discharges instead of observed discharges as input data.

The satisfactory performance obtained when simulating the drainage discharge using the SIDRA-RU model is noteworthy. Indeed, the RMSE value corresponds to 1.16 mm per day when NSE and KGE are equal to 0.53 and 0.78, respectively.

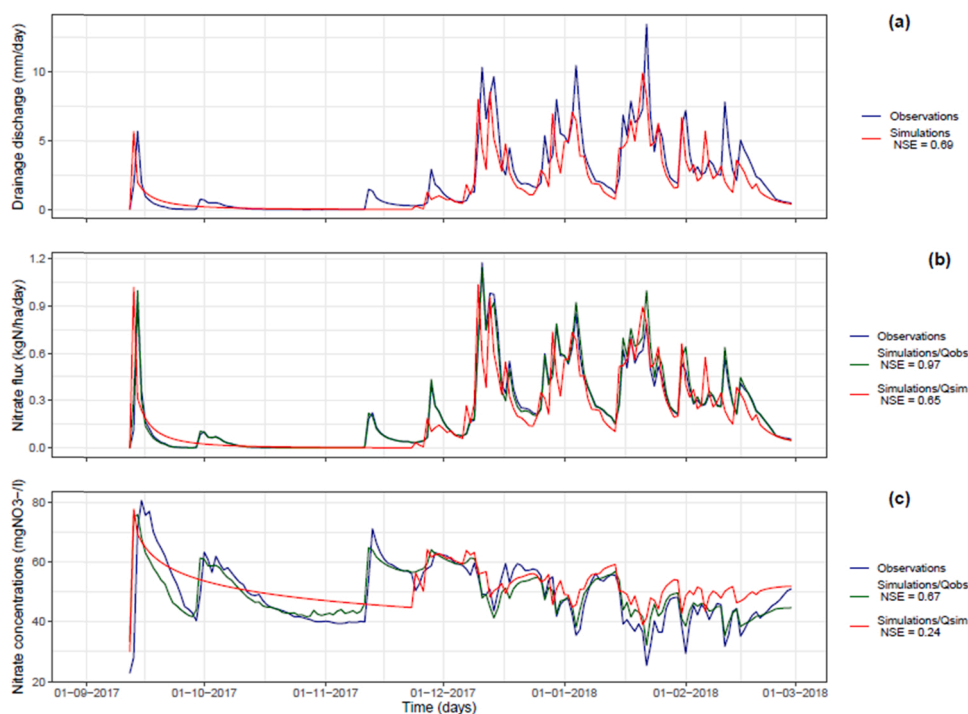
The NIT-DRAIN model performance (i.e., RMSE, NSE and KGE), corresponding to the use of drainage discharge simulations as input, are presented in Table 5. On the one hand, a significant impact is observed on the performance (e.g.,  $\Delta_{NSE} = -1.31$ ) when simulating nitrate concentrations using simulated discharges (SIDRA-RU model output) instead of observed discharges. On the other hand, the performance of the NIT-DRAIN is less impacted in the case of nitrate flux simulations (e.g.,  $\Delta_{NSE} = -0.41$ ).

Fig. 7 shows the monthly amplitude of the generated absolute errors on discharge (purple boxplots) and relative errors on nitrate concentration simulations (green and orange boxplots) in comparison with their respective observations.

Green boxplots describe the relative errors of nitrate concentration simulations when using discharge observations as model input. In this case, the monthly distribution of the relative error does not exceed 30%. Conversely, significant error (up to 60%) can be noted when using the drainage discharge simulations as input data in the nitrate model



**Fig. 7.** Nitrate concentrations relative error, resulting from the use of discharge observations and simulations as NIT-DRAIN inputs, are represented by green and orange boxplots, respectively. Discharge absolute error is shown using purple boxplots.



**Fig. 8.** Flux and nitrate concentration simulations obtained using two sources of input discharge (i.e., observations and SIDRA-RU simulations). Nitrate flux and concentrations are compared with their respective observations.

(orange boxplots).

This experiment is conducted in order to have a more detailed view concerning the seasonal distribution of the error of both nitrate concentrations and drainage discharges. Errors obtained on low drainage discharge leading to small nitrate flux values (i.e., observed at the beginning of the drainage season) have a substantial impact on the quality of the nitrate concentration simulations. The opposite is observed during the intensive drainage season (from December to February) where a relatively significant error in drainage discharge simulations has only a small impact on the quality of nitrate concentrations.

Moreover, Fig. 8 shows the hourly variation of the simulated (a) drainage discharge, (b) nitrate flux, and (c) nitrate concentrations against their respective observations (blue lines) for the 2017–2018

hydrological year. Nitrate flux and concentrations are systematically well simulated when using observed discharges as input for the nitrate model (green lines). Otherwise, the first months of the drainage season are marked by worse nitrate simulations when replacing the drainage discharge observations by simulations (red lines). In addition, an over-estimation of nitrate concentrations (red lines) is observed during the intensive drainage season (i.e., December to February). These results suggest that the low drainage discharge values may have a significant impact on nitrate concentration modeling but less so for flux simulation, which is in agreement with the results presented in Fig. 7. This is particularly applicable at the beginning of the drainage season when the soil is highly loaded with nitrate.



## 6. Discussion

The NIT-DRAIN modeling approach has been designed to enable the simple description of the nitrate transfer in the soil profile toward the drain. The model requires the RNBW data and the drainage discharge as inputs to simulate nitrate concentrations and flux at the agricultural drainage outlet. The NIT-DRAIN modeling approach is based on the decomposition of the subsurface soil profile into three interconnected and conceptual reservoirs. Hence, two transfer functions were considered from the literature to allow for the nitrate movement between these three defined reservoirs. This approach was tested and validated over the 6 years of hourly observation data collected from the experimental agricultural field of Rampillon. This study focused on the improvement of nitrate concentration modeling. This variable remains much more challenging than nitrate flux modeling, which has been addressed in a number of studies to date.

The originality of the model lies in the fact that no process other than nitrate lixiviation is considered. Hence, we have assumed the nitrogen processes during the winter season to be negligible (e.g., nitrate denitrification, mineralization, or assimilation by plants) due to the low temperatures and the fast flow transfer velocities caused by the presence of tile drainage. This led us to limit the simulation to the non-growing season, ranging between September and February. Thus, the results confirm that only hydraulics are responsible for nitrate exportations during this period. Moreover, the importance of the non-growing season has been stressed by Ren et al. (2022). Indeed, this period has been identified as critical in terms of water and nutrient losses due to the low values of evapotranspiration and plant uptake. According to Ren et al. (2022), this period of the year is responsible for the main water and nitrate exportations through the tile drain. In addition, the study conducted by Liu et al. (2020) showed that the top 27% of the drainage discharge (generally occurring during the non-growing season) contributes to 75% of the total nitrate exportations.

The NIT-DRAIN model makes it possible to consider both flushing and dilution patterns. On the one hand, the flushing episodes are observed when the superficial soil is loaded with a significant quantity of nitrate, thus leading to the occurrence of the preferential nitrate transfer above the drain location. On the other hand, dilution episodes emphasize the low lateral nitrate transfer characterized by a significant residence time. The data analysis indicates that the wet years tend to show significant dilution episodes, while the dry years are usually characterized by frequent flushing episodes.

According to the NIT-DRAIN model, flushing patterns are due to the high nitrate exportations from the fast compartment (FC), typically observed during the first flow events of the drainage season (Fig. 5c). Thus, the FC compartment becomes almost completely empty when rainfall infiltrations leached most of the nitrate initially available at low soil depths. In this period of the year, the residual nitrate concentrations exported with water from the SSC and DSC low compartments are mixed with the lightly nitrate-loaded water coming from the FC compartment. This transfer mode promotes the occurrence of dilution patterns.

In general, our modeling approach enables an accurate shifting between flushing and dilution patterns, which involves preferential and matrix flow contributions, respectively. Several studies have shown the significant contribution of preferential flow due to the presence of soil macropores above the tile drain location. Thus, multiple conceptual models have been implemented while considering a dual permeability approach (Frey et al., 2016; Gerke and Maximilian Köhne, 2004). In addition, Stone and Wilson (2006) highlighted the role of preferential flow pathways through the consideration of a conservative mixing analysis and a hydrograph separation method. According to their study, the contribution rate of preferential flows ranges from 11% to 51% of the total flow as long as an agricultural drainage network is in place. Our results are in agreement with their finding, thus indicating that, on average, 18% (i.e.,  $1 - \alpha$ ) of the total available nitrate for leaching is exported from the model compartment (FC) responsible for preferential

transfers.

In this paper, RNBW values were estimated through different temporal calibration intervals and compared with the measurements in order to assess the model robustness and accuracy. Thus, the RNBW values estimated on multiannual and global calibration periods are comparable to the measurements. However, the annual estimated values of RNBW show some exceptions (Fig. 6) due mainly to a significant degree of freedom and data heterogeneity leading to equifinality issues (Table 3). In general, less than 5 kgN/ha/year was recorded as the difference between RNBW measurements and estimations. This difference is considered insignificant compared to the average imprecision calculated in the N surpluses in agricultural soils according to Poisvert et al. (2017). In fact, the uncertainty in N surpluses considered in their study reached 45 kgN.ha<sup>-1</sup>.year<sup>-1</sup> despite the diversity of their dataset, taking into account nitrogen balances over 70 years and based on agricultural soils distributed over more than 90 departments, in France. In addition, the difference between the observations and the simulations of nitrate exportations (N losses) according to the NIT-DRAIN model does not exceed 0.6 kgN.ha<sup>-1</sup> per year, related to an RMSE of 0.06 kgN.ha<sup>-1</sup> and 0.1 kgN.ha<sup>-1</sup> using drainage discharge observations and simulations as inputs, respectively. This result is considered encouraging when compared with other model outputs. Indeed, Malone et al. (2010) obtained RMSE values of 5.15 kgN.ha<sup>-1</sup> and 9.03 kgN.ha<sup>-1</sup>, respectively, when simulating nitrate losses from their two field experiments.

In addition, one should take into consideration the existing difference between areas covering the RNBW measurements (5915 km<sup>2</sup>, Seine-et-Marne department) and estimations (3.55 km<sup>2</sup>, Rampillon). The availability of RNBW measurements at a local scale may be useful to consolidate the accuracy of our results. In all cases, we recommend the use of multiannual calibration intervals including both dry and wet seasons in order to limit the solution possibilities and ensure the uniqueness of parameter and RNBW values.

An annual calibration framework was carried out to access the model performance and the inter-annual variability of the inputs. According to Moriasi et al. (2015), an NSE value greater than 0.35 is considered as satisfactory in the case of nitrate concentration [NO<sub>3</sub>]<sup>-</sup> modeling. The model approach presented in this study shows NSE values ranging from 0.52 to 0.91, which confirms the ability of the model to simulate faithfully nitrate concentrations, by using RNBW and drainage discharge observations as input data. The use of the RNBW variable can be viewed as a strong indicator that could provide a good estimation of the soil nitrate load in subsurface drained agricultural lands at the beginning of the winter season. The annual model calibration shows different variability levels of the parameters. Indeed, the sharing ( $\alpha$ ) and soil depth ( $p_3$ ) coefficients show the lowest variability, while the other parameters may require further investigations to limit their temporal variation. In general, the performance obtained with the annual calibration remains satisfactory and promising in regard to nitrate concentration simulations. A sensitivity analysis (SA) can help to understand, in depth, the impact of these parameters on the model performance (Pianosi et al., 2016). The NIT-DRAIN parameter values were also estimated using the SST and global calibration methods. The result is consistent with the one obtained using annual calibration and confirms the robustness of the model. This positive performance should be further consolidated by testing the spatial robustness of the model (Jeantet et al., 2021; Lindström et al., 2010). The model testing on additional data fields that involve variable spatial scales and soil properties could be useful for confirming the spatial robustness of the parameters such as those related to the soil properties (e.g.,  $v_i$ ; nitrate transfer velocities).

The NIT-DRAIN was also tested on a daily time step using drainage discharge simulation as input data. The measured data (e.g., drainage discharge, nitrate flux and concentrations) were aggregated from hourly into daily time step in order to allow for the use of simulated discharge as model input instead of observed discharge. The results show that simulations of nitrate concentrations are strongly dependent on the accuracy of the simulated drainage discharge values. Indeed, Fig. 7

shows that the model outputs (i.e., nitrate concentrations) are highly sensitive to the error resulting from the low values of drainage discharge simulated at the beginning of the hydrological season, in particular. On the one hand, the use of simulated drainage discharge increases the total mean relative error of nitrate concentration simulations versus observations by 10% (e.g., 8% when using  $Q_{obs}$  up to 18% with the use of  $Q_{sim}$ ). On the other hand, one can observe that nitrate flux is correctly simulated and less exposed to discharge discrepancies in comparison with nitrate concentrations (Table 5). This finding was expected since the error on drainage discharge has a direct impact on nitrate concentrations. At the same time, the discrepancy related to nitrate flux simulations is lower due to the combined and mitigated effect of discharge and nitrate concentration errors. Hence, while several water quality models focus on nitrate flux simulations instead of concentrations (Ale et al., 2013; Gowda et al., 2012; Motarjemi et al., 2021; Santhi et al., 2001), the NIT-DRAIN model shows a significant ability to correctly simulate both flux and nitrate concentrations.

## 7. Conclusion

This paper describes the new conceptual model called “NIT-DRAIN.” The model is able to simulate up to hourly nitrate exportations from agricultural drained lands using a limited number of inputs. The NIT-DRAIN model needs the calibration of seven parameters, which manage the nitrate quantity and velocity transferred between the three defined conceptual reservoirs. The adopted approach has been tested and validated using data obtained from the fully drained agricultural catchment of Rampillon (355 ha). The dataset covers 6 years of nitrate and drainage discharge observations at the hourly time step. The model robustness was tested by calibrating the input parameters according to the available observations of nitrate concentrations, through different time scales (i.e., annual, multiannual, over the entire dataset period). These tests showed an accurate model simulation of nitrate flux and concentrations at the drainage system outlet. In addition, high consistency between the parameter values was observed by using either multiannual or global calibration frameworks.

One of the key points of this modeling approach is the correct simulation of the nitrate flushing and dilution patterns through the consideration of both preferential and matrix flows. Indeed, we focused on the best assessment of the preferential flow since several recent studies emphasized the significant role of macropores, which supports the occurrence of this type of flow. The derived approach allows the NIT-DRAIN model to switch correctly between different nitrate transfer processes. In addition, the total residual quantity of nitrate in the three conceptual model reservoirs by the end of February constitutes a valuable indicator to farmers. This information can help them to modulate the nitrate input depending on the available mineral nitrogen of the soil at this period. Otherwise, the spring fertilization supply will be taken into consideration in a future work by estimating the nitrate quantity of the soil during the spring season using variational data assimilation approach (Chelil et al., 2022).

In some cases, the temporal variability of the model parameters has been noted when using the annual calibration framework. This issue is common to several conceptual models and can be resolved by improving the model structure or by applying further constraints to the model including high-frequency observations and local RNBW measurements. Finally, the spatial robustness of the model should be investigated through the implementation of validation tests using data from various agricultural catchment sizes.

## Declaration of Competing Interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

## Acknowledgments

This research was supported by a PhD Grant from INRAE AQUA department and ANR LowNitrate. The authors would like to thank AQUI Brie association for their support, farmers' involvement and water agency *Seine Normandie* (AESN) for equipment financial support.

## Appendix A. Supporting information

Supplementary data associated with this article can be found in the online version at [doi:10.1016/j.agwat.2022.107798](https://doi.org/10.1016/j.agwat.2022.107798).

## References

- Agrawal, G., Lunkad, S., Malkhed, T., 1999. Diffuse agricultural nitrate pollution of groundwaters in India. *Water Sci. Technol.* 39, 67–75.
- Ale, S., Gowda, P.H., Mulla, D.J., Moriasi, D.N., Youssef, M.A., 2013. Comparison of the performances of DRAINMOD-NII and ADAPT models in simulating nitrate losses from subsurface drainage systems. *Agric. Water Manag.* 129, 21–30.
- Almasri, M.N., Kaluarachchi, J.J., 2004. Assessment and management of long-term nitrate pollution of ground water in agriculture-dominated watersheds. *J. Hydrol.* 295, 225–245.
- Arlot, M.-P., 1999. Nitrates dans les eaux: Drainage acteur, drainage témoin ? Les enseignements d'une approche hydrologique et hydraulique sur (1) l'influence du drainage agricole sur la contamination diffuse des eaux par les nitrates et (2) sur les possibilités d'utiliser les parcelles drainées pour l'analyse de la dite contamination.
- Arnold, G., J. Moriasi, N., W. Gassman, D., C. P., Abbaspour, K., White, J., Srinivasan, M., Santhi, R., D. Harmel, C., van Griensven, R., W. Van Liew, A., Kannan, N. M., Jha, M. K., 2012. SWAT: Model Use, Calibration, and Validation. *Trans. ASABE* 55, 1491–1508.
- Beauchamp, K.H., Pavelis, G., 1987. A history of drainage and drainage methods. *Farm Drain. U. S.: Hist., Status, Prospects* 1455, 13.
- Billen, G., Garnier, J., Lassaletta, L., 2013. The nitrogen cascade from agricultural soils to the sea: modelling nitrogen transfers at regional watershed and global scales. *Philos. Trans. R. Soc. B: Biol. Sci.* 368, 20130123.
- Bockstaller, C., SIRAMI, C., Sheeren, D., Keichinger, O., Arnaud, L., Arthur, F., Angevin, F., Dominique, L., Guillaume, M., Delaroché, E., and Ceschia, E. (2021). Contribution of remote sensing to the calculation of agri-environmental indicators for the CAP, farmers and stakeholders.
- Branger, F., Tournebize, J., Carlier, N., Kao, C., Braud, I., Vauclin, M., 2009. A simplified modelling approach for pesticide transport in a tile-drained field: The PESTDRAIN model. *Agric. Water Manag.* 96, 415–428.
- Brisson, N., Gary, C., Justes, E., Roche, R., Mary, B., Ripoche, D., Zimmer, D., Sierra, J., Bertuzzi, P., Burger, P., 2003. An overview of the crop model STICS. *Eur. J. Agron.* 18, 309–332.
- Burns, D.A., Pellerin, B.A., Miller, M.P., Capel, P.D., Tesoriero, A.J., Duncan, J.M., 2019. Monitoring the riverine pulse: Applying high-frequency nitrate data to advance integrative understanding of biogeochemical and hydrological processes. *WIREs Water* 6, e1348.
- Burns, I., 1974. A model for predicting the redistribution of salts applied to fallow soils after excess rainfall or evaporation. *J. Soil Sci.* 25, 165–178.
- Burns, I.G., 1975. An equation to predict the leaching of surface-applied nitrate. *J. Agric. Sci.* 85, 443–454.
- Burns, I.G., 1976. Equations to predict the leaching of nitrate uniformly incorporated to a known depth or uniformly distributed throughout a soil profile. *J. Agric. Sci.* 86, 305–313.
- Chelil, S., Oubanas, H., Henine, H., Gejadze, I., Olivier Malaterre, P., Tournebize, J., 2022. Variational data assimilation to improve subsurface drainage model parameters. *J. Hydrol.*, 128006
- Clay, D.E., Carlson, C.G., Brix-Davis, K., Oolman, J., Berg, B., 1997. Soil sampling strategies for estimating residual nitrogen. *J. Prod. Agric.* 10, 446–452.
- Dinnes, D.L., Karlen, D.L., Jaynes, D.B., Kaspar, T.C., Hatfield, J.L., Colvin, T.S., Cambardella, C.A., 2002. Nitrogen management strategies to reduce nitrate leaching in tile-drained Midwestern soils. *Agron. J.* 94, 153–171.
- Directive, C., 1991. Concerning the protection of waters against pollution caused by nitrates from agricultural sources. *Off. J.* 3/75.
- Dupas, R., Delmas, M., Dorioz, J.-M., Garnier, J., Moatar, F., Gascuel-Oudou, C., 2015. Assessing the impact of agricultural pressures on N and P loads and eutrophication risk. *Ecol. Indic.* 48, 396–407.
- Dupas, R., Curie, F., Gascuel-Oudou, C., Moatar, F., Delmas, M., Parnaudeau, V., Durand, P., 2013. Assessing N emissions in surface water at the national level: comparison of country-wide vs. regionalized models. *Sci. Total Environ.* 443, 152–162.
- Eckhardt, K., 2005. How to construct recursive digital filters for baseflow separation. *Hydrol. Process.* 19, 507–515.
- Frey, S.K., Hwang, H.-T., Park, Y.-J., Hussain, S.I., Gottschall, N., Edwards, M., Lapen, D. R., 2016. Dual permeability modeling of tile drain management influences on hydrologic and nutrient transport characteristics in macroporous soil. *J. Hydrol.* 335, 392–406.
- Gaur, A., Horton, R., Jaynes, D.B., Baker, J.L., 2006. Measured and predicted solute transport in a tile drained field. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 70, 872–881.

- Gerke, H.H., Maximilian Köhne, J., 2004. Dual-permeability modeling of preferential bromide leaching from a tile-drained glacial till agricultural field. *J. Hydrol.* 289, 239–257.
- Gowda, P., Mulla, D., Desmond, E., Ward, A., Moriasi, D., 2012. ADAPT: Model use, calibration and validation. *Trans. ASABE (Am. Soc. Agric. Biol. Eng.)* 55, 1345–1352.
- Gupta, H.V., Kling, H., Yilmaz, K.K., Martinez, G.F., 2009. Decomposition of the mean squared error and NSE performance criteria: Implications for improving hydrological modelling. *J. Hydrol.* 377, 80–91.
- Hansen, E.M., Djurhuus, J., 1996. Nitrate leaching as affected by long-term N fertilization on a coarse sand. *Soil Use Manag.* 12, 199–204.
- Henine, H., Jeantet, A., Chaumont, C., Chelil, S., Lauvernet, C., Tournebize, J., 2022. Coupling of a subsurface drainage model with a soil reservoir model to simulate drainage discharge and drain flow start. *Agric. Water Manag.* 262, 107318.
- Jacobsen, O.H., Kjær, J., 2007. Is tile drainage water representative of root zone leaching of pesticides? *Pest Manag. Sci. Former. Pestic. Sci.* 63, 417–428.
- Jaynes, D., Dinnes, D., Meek, D., Karlen, D., Cambardella, C., Colvin, T., 2004. Using the late spring nitrate test to reduce nitrate loss within a watershed. *J. Environ. Qual.* 33, 669–677.
- Jeantet, A., Henine, H., Chaumont, C., Collet, L., Thirel, G., Tournebize, J., 2021. Robustness of a parsimonious subsurface drainage model at the French national scale. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 25, 5447–5471.
- Jiang, Q., Qi, Z., Madramootoo, C.A., Smith, W., Abbasi, N.A., Zhang, T., 2020. Comparison of RZWQM2 and DNDC Models to Simulate Greenhouse Gas Emissions under Combined Inorganic/Organic Fertilization in a Subsurface-Drained Field. *Trans. ASABE* 63, 771–787.
- Jordan, T.E., Correll, D.L., Weller, D.E., 1997. Relating nutrient discharges from watersheds to land use and streamflow variability. *Water Resour. Res.* 33, 2579–2590.
- Jury, W.A., and Roth, K., 1990, "Transfer functions and solute movement through soil: theory and applications," Birkhäuser Verlag AG.
- Kenney, J.F., Keeping, E., 1962. Root mean square. *Math. Stat. Pt 1*, 59–60.
- Kirchmann, H., Johnston, A.E.J., Bergström, L.F., 2002. Possibilities for reducing nitrate leaching from agricultural land. *AMBIO: A J. Hum. Environ.* 31 (5), 404–408.
- Kjær, J., Ernstsen, V., Jacobsen, O.H., Hansen, N., de Jonge, L.W., Olsen, P., 2011. Transport modes and pathways of the strongly sorbing pesticides glyphosate and pendimethalin through structured drained soils. *Chemosphere* 84, 471–479.
- Kladivko, E.J., Scoyoc, Van, Monke, G.E., Oates, E.J., M, K., Pask, W., 1991. Pesticide and nutrient movement into subsurface tile drains on a silt loam soil in Indiana. *J. Environ. Qual.* 20, 264–270.
- Klemeš, V., 1986. Operational testing of hydrological simulation models. *Hydrol. Sci. J.* 31, 13–24.
- Kohler, A., Abbaspour, K.C., Fritsch, M., Schuln, R., 2003. Using simple bucket models to analyze solute export to subsurface drains by preferential flow. *Vadose Zone J.* 2, 68–75.
- Kumazawa, K., 2002. Nitrogen fertilization and nitrate pollution in groundwater in Japan: Present status and measures for sustainable agriculture. *Nutr. Cycl. Agroecosyst.* 63, 129–137.
- Lasdon, L.S., Waren, A.D., Jain, A., Ratner, M., 1978. Design and testing of a generalized reduced gradient code for nonlinear programming. *ACM Trans. Math. Softw. (TOMS)* 4, 34–50.
- Lassaletta, L., Billen, G., Grizzetti, B., Anglade, J., Garnier, J., 2014. 50 year trends in nitrogen use efficiency of world cropping systems: the relationship between yield and nitrogen input to cropland. *Environ. Res. Lett.* 9, 105011.
- Leonard, R., Knisel, W., Still, D., 1987. GLEAMS: Groundwater loading effects of agricultural management systems. *Trans. ASAE* 30, 1403–1418.
- Lesaffre, B., 1988, *Fonctionnement hydrologique et hydraulique du drainage souterrain des sols temporairement engorgés: débits de pointe et modèle SIDRA: extension des principes théoriques de Boussinesq et Guyon.*
- Li, C., Frolking, S., Frolking, T.A., 1992a. A model of nitrous oxide evolution from soil driven by rainfall events: 1. Model structure and sensitivity. *J. Geophys. Res.: Atmospheres* 97, 9759–9776.
- Li, C., Frolking, S., Frolking, T.A., 1992b. A model of nitrous oxide evolution from soil driven by rainfall events: 2. Model applications. *J. Geophys. Res.: Atmospheres* 97, 9777–9783.
- Lindström, G., Pers, C., Rosberg, J., Strömqvist, J., Arheimer, B., 2010. Development and testing of the HYPE (Hydrological Predictions for the Environment) water quality model for different spatial scales. *Hydrol. Res.* 41, 295–319.
- Liu, W., Birgand, F., Tian, S., Chen, C., 2021. Event-scale hysteresis metrics to reveal processes and mechanisms controlling constituent export from watersheds: A review. *Water Res.* 200, 117254.
- Liu, W., Youssef, M.A., Birgand, F.P., Chescheir, G.M., Tian, S., Maxwell, B.M., 2020. Processes and mechanisms controlling nitrate dynamics in an artificially drained field: Insights from high-frequency water quality measurements. *Agric. Water Manag.* 232, 106032.
- Ma, L., Ahuja, R., T. Nolan, L., W. Malone, B., J. Trout, R., T, Qi, Z., 2012. Root Zone Water Quality Model (RZWQM2): Model Use, Calibration, and Validation. *Trans. ASABE* 55, 1425–1446.
- Magdoff, F.R., Jokela, W.E., Fox, R.H., Griffin, G.F., 1990. A soil test for nitrogen availability in the northeastern United States. *Commun. Soil Sci. Plant Anal.* 21, 1103–1115.
- Magesan, G., Scotter, D., White, R., 1994. A transfer function approach to modeling the leaching of solutes to subsurface drains. I. Nonreactive solutes. *Soil Res.* 32, 69–83.
- Malone, R., Jaynes, D., Ma, L., Nolan, B., Meek, D., Karlen, D., 2010. Soil-test N recommendations augmented with PEST-optimized RZWQM simulations. *J. Environ. Qual.* 39, 1711–1723.
- Mander, Ü., Tournebize, J., Espenberg, M., Chaumont, C., Torga, R., Garnier, J., Muhel, M., Maddison, M., Lebrun, J.D., Uher, E., Remm, K., Pärn, J., Soosaar, K., 2021. High denitrification potential but low nitrous oxide emission in a constructed wetland treating nitrate-polluted agricultural run-off. *Sci. Total Environ.* 779, 146614.
- Mary, B., Beaudoin, N., Justes, E., Machet, J., 1999. Calculation of nitrogen mineralization and leaching in fallow soil using a simple dynamic model. *Eur. J. Soil Sci.* 50, 549–566.
- Meyer, N., Bergez, J.-E., Constantin, J., Justes, E., 2018. Cover crops reduce water drainage in temperate climates: A meta-analysis. *Agron. Sustain. Dev.* 39, 3.
- Meyer, N., Bergez, J.-E., Constantin, J., Belleville, P., Justes, E., 2020. Cover crops reduce drainage but not always soil water content due to interactions between rainfall distribution and management. *Agric. Water Manag.* 231, 105998.
- Minnaudo, C., Dupas, R., Gascuel-Oudoux, C., Roubex, V., Danis, P.-A., Moatar, F., 2019. Seasonal and event-based concentration-discharge relationships to identify catchment controls on nutrient export regimes. *Adv. Water Resour.* 131, 103379.
- Mohtadullah, K., 1990, *Interdisciplinary planning, data needs and evaluation for drainage projects.* In "Land drainage - Drainage agricole: actes du 4ème séminaire international sur le drainage, Le Caire, EGY, 23–24 février 1990", pp. 127–140. Cemagref Editions, Antony.
- Moriasi, D., Gitau, M., Pai, N., Daggupati, P., 2015. Hydrologic and water quality models: performance measures and evaluation criteria. *Trans. ASABE (Am. Soc. Agric. Biol. Eng.)* 58, 1763–1785.
- Moriasi, D., Wilson, B., Douglas-Mankin, K., Arnold, J., Gowda, P., 2012. Hydrologic and water quality models: Use, calibration, and validation. *Trans. ASABE* 55, 1241–1247.
- Motarjemi, S.K., Rosenbom, A.E., Iversen, B.V., Plauborg, F., 2021. Important factors when simulating the water and nitrogen balance in a tile-drained agricultural field under long-term monitoring. *Sci. Total Environ.* 787, 147610.
- Nash, J.E., Sutcliffe, J.V., 1970. River flow forecasting through conceptual models part I—A discussion of principles. *J. Hydrol.* 10, 282–290.
- Oenema, O., Boers, P., Van Eerd, M., Fraters, B., Van der Meer, H., Roest, C., Schröder, J., Willems, W., 1998. Leaching of nitrate from agriculture to groundwater: the effect of policies and measures in the Netherlands. *Environ. Pollut.* 102, 471–478.
- Paris, T., 2004, *Experimental study of solute transport in an artificially drained shallow water-table*, ENGREF (AgroParisTech).
- Payraudeau, S., 2002, *Modélisation distribuée des flux d'azote sur des petits bassins versants méditerranéens*, ENGREF (AgroParisTech).
- Perrin, C., Michel, C., Andréassian, V., 2001. Does a large number of parameters enhance model performance? Comparative assessment of common catchment model structures on 429 catchments. *J. Hydrol.* 242, 275–301.
- Pianos, F., Beven, K., Freer, J., Hall, J.W., Rougier, J., Stephenson, D.B., Wagener, T., 2016. Sensitivity analysis of environmental models: A systematic review with practical workflow. *Environ. Model. Softw.* 79, 214–232.
- Poisvert, C., Curie, F., Moatar, F., 2017. Annual agricultural N surplus in France over a 70-year period. *Nutr. Cycl. Agroecosyst.* 107, 63–78.
- Puech, T., Schott, C., Mignolet, C., 2020. Characterising the diversity and spatial differentiation of crop managements at a regional scale. *Eur. J. Agron.* 120, 126112.
- Ren, D., Engel, B., Mercado, J.A.V., Guo, T., Liu, Y., Huang, G., 2022. Modeling and assessing water and nutrient balances in a tile-drained agricultural watershed in the U.S. Corn Belt. *Water Res.* 210, 117976.
- Richard, T.L., Steenhuis, T.S., 1988. Tile drain sampling of preferential flow on a field scale. *J. Contam. Hydrol.* 3, 307–325.
- Ruiz, L., Abiven, S., Martin, C., Durand, P., Beaujouan, V., Molenat, J., 2002. Effect on nitrate concentration in stream water of agricultural practices in small catchments in Brittany: II. Temporal variations and mixing processes. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 6.
- Salomez, J., Hofman, G., 2002. Residual nitrate nitrogen in autumn as an environmental quality indicator of N-fertilisation practices. *Fertil. Context Resour. Manag. Agric.* 11–21.
- Santhi, C., Arnold, J.G., Williams, J.R., Dugas, W.A., Srinivasan, R., Hauck, L.M., 2001. Validation of the SWAT model on a large RWER basin with point and non point sources. *JAWRA J. Am. Water Resour. Assoc.* 37, 1169–1188.
- Schilling, K., Zhang, Y.-K., 2004. Baseflow contribution to nitrate-nitrogen export from a large, agricultural watershed, USA. *J. Hydrol.* 295, 305–316.
- Schilling, K.E., Jindal, P., Basu, N.B., Helmers, M.J., 2012. Impact of artificial subsurface drainage on groundwater travel times and baseflow discharge in an agricultural watershed, Iowa (USA). *Hydrol. Process.* 26, 3092–3100.
- Scholefield, D., Tyson, K., Garwood, E., Armstrong, A., Hawkins, J., Stone, A., 1993. Nitrate leaching from grazed grassland lysimeters: effects of fertilizer input, field drainage, age of sward and patterns of weather. *J. Soil Sci.* 44, 601–613.
- Simunek, J., Sejna, M., and Van Genuchten, M.T. (1999). "The HYDRUS-2D software package for simulating the two-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media." Technical report. International Groundwater Modelling Center - Colorado School of Mines, USA.
- Skaggs, R.W., Brevé, M.A., Gilliam, J.W., 1994. Hydrologic and water quality impacts of agricultural drainage. *Crit. Rev. Environ. Sci. Technol.* 24, 1–32.
- Skaggs, R.W., Youssef, M., Chescheir, G.M., 2012. DRAINMOD: model use, calibration, and validation. *Trans. ASABE* 55, 1509–1522.
- Smith, W., Grant, B., Qi, Z., He, W., VanderZaag, A., Drury, C.F., Helmers, M., 2020. Development of the DNDC model to improve soil hydrology and incorporate mechanistic tile drainage: A comparative analysis with RZWQM2. *Environ. Model. Softw.* 123, 104577.
- Spahr, N.E., Dubrovsky, N.M., Gronberg, J.M., Franke, O., and Wolock, D.M. (2010). "Nitrate loads and concentrations in surface-water base flow and shallow groundwater for selected basins in the United States, water years 1990–2006." U. S. Geological Survey.

- Steenhuis, T.S., Bodnar, M., Geohring, L.D., Aburime, S.A., Wallach, R., 1997. A simple model for predicting solute concentration in agricultural tile lines shortly after application. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 1, 823–833.
- Stone, W.W., Wilson, J.T., 2006. Preferential flow estimates to an agricultural tile drain with implications for glyphosate transport. *J. Environ. Qual.* 35, 1825–1835.
- Tang, T., Stokal, M., van Vliet, M.T.H., Seuntjens, P., Burek, P., Kroeze, C., Langan, S., Wada, Y., 2019. Bridging global, basin and local-scale water quality modeling towards enhancing water quality management worldwide. *Curr. Opin. Environ. Sustain.* 36, 39–48.
- Tournebize, J., Kao, C., Nikolic, N., Zimmer, D., 2004. Adaptation of the STICS model to subsurface drained soils. *Agronomie* 24, 305–313.
- Tournebize, J., Gramaglia, C., Birmant, F., Bouarfa, S., Chaumont, C., Vincent, B., 2012. Co-design of constructed wetlands to mitigate pesticide pollution in a drained catch-basin: a solution to improve groundwater quality. *Irrig. Drain.* 61, 75–86.
- Tunqui Neira, J.M., Andréassian, V., Tallec, G., Mouchel, J.M., 2020. Technical note: A two-sided affine power scaling relationship to represent the concentration–discharge relationship. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 24, 1823–1830.
- Unnikrishna, P., McDonnell, J., Stewart, M., 1995. *Solute Modeling in Catchment Systems*. Wiley, England.
- Utermann, J., Kladvik, E., and Jury, W. (1990). "Evaluating pesticide migration in tile-drained soils with a transfer function model," Rep. No. 0047–2425. Wiley Online Library.
- Vidal, J.-P., Martin, E., Franchistéguy, L., Baillon, M., Soubeyrou, J.-M., 2010. A 50-year high-resolution atmospheric reanalysis over France with the Safran system. *Int. J. Climatol.* 30, 1627–1644.
- Yin, X., Beaudoin, N., Ferchaud, F., Mary, B., Strullu, L., Chlébowski, F., Clivot, H., Herre, C., Duval, J., Louarn, G., 2020. Long-term modelling of soil N mineralization and N fate using STICS in a 34-year crop rotation experiment. *Geoderma* 357, 113956.
- Youssef, A., M, e, al, 2005. The nitrogen simulation model, drainmod-N II. *Trans. ASAE* 48, 611–626.
- Zhi, W., and Li, L. (2020). The shallow and deep hypothesis: subsurface chemical contrasts shape nitrate export patterns from different land uses. *Environmental Science & Technology*.

## Supplemental material

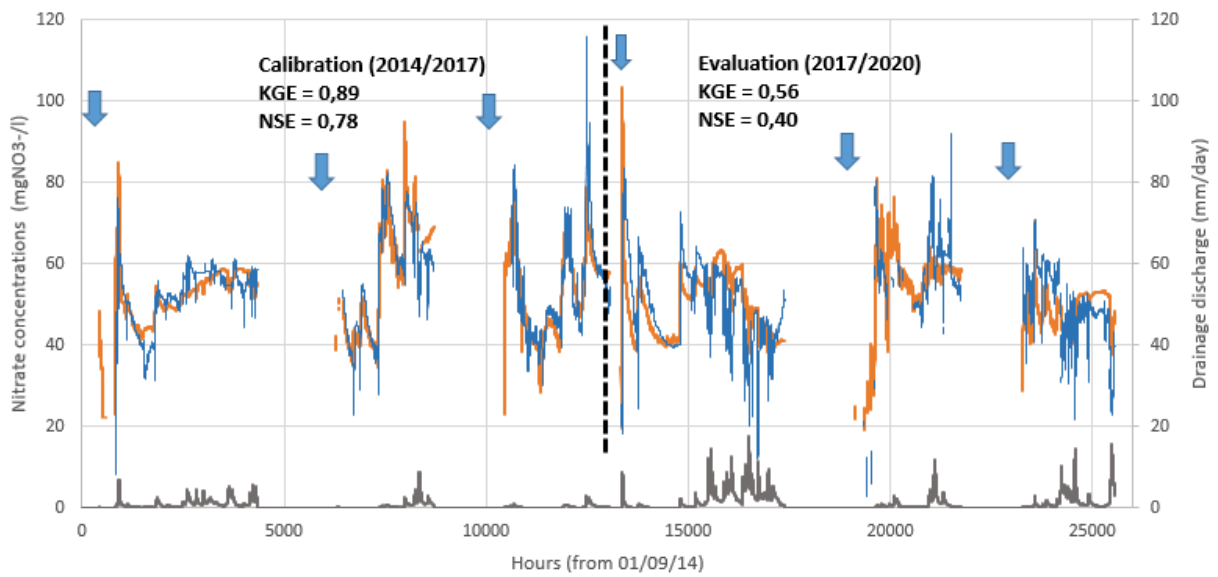


Figure A. 1: SST result; Calibration in P1, validation in P2. Observed discharge is plotted in gray, observed and simulated nitrate concentrations are plotted in orange and blue, respectively.

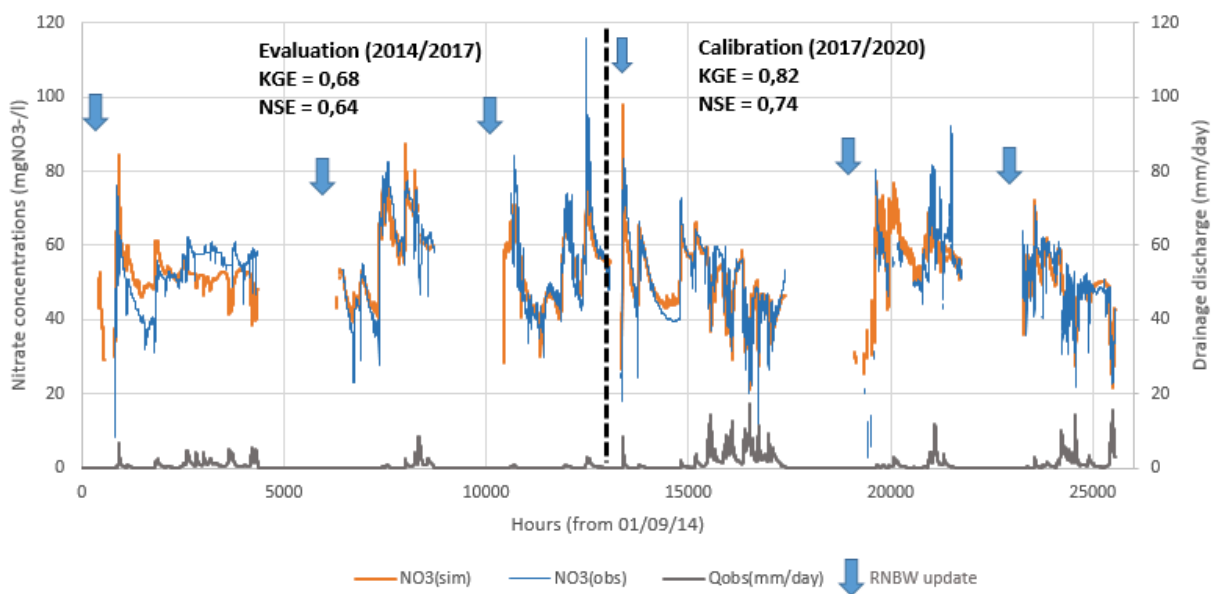


Figure A. 2: SST result; Calibration in P2, validation in P1. Observed discharge is plotted in gray, observed and simulated nitrate concentrations are plotted in orange and blue, respectively.

## **Chapitre II.3 : Robustesse du modèle de transfert des nitrates en milieu agricole artificiellement drainé : NIT-DRAIN**

---

La pollution diffuse des eaux douces par les nitrates fait partie des préoccupations majeures des gouvernements. En milieu agricole, les vitesses de transfert des nitrates dans le sol sont plus importantes en présence d'un système artificiel de drainage agricole. Cela conduit généralement à une augmentation des exportations d'azote vers les cours d'eau et nappes phréatiques. Dès lors, il serait intéressant de développer des outils expérimentaux ou numériques robustes afin de mieux comprendre les mécanismes de transfert des nitrates dans les sols agricoles artificiellement drainés.

Le développement du modèle NIT-DRAIN permettant à la fois, l'estimation des reliquats azotés en entrée d'hiver (REH) et la simulation des flux et concentrations en nitrate en parcelles agricoles drainées a fait l'objet d'une validation sur un seul site en France (Rampillon, 355 ha). Le présent chapitre permet l'évaluation de la robustesse spatiotemporelle du modèle NIT-DRAIN sur trois sites différents (La Jaillièrre, 1 ha ; Gobard, 36 ha et Rampillon, 355 ha). Nous testerons le fonctionnement du modèle sur les trois sites dans l'optique de proposer un jeu de paramètres unique et générique à l'ensemble des sites.

Une partie du contenu de ce chapitre a fait l'objet d'une communication orale et écrite au séminaire « Retours d'expérience autour du REH/RDD/APL : Echantillonnage, interprétation, modélisation, accompagnement des agriculteurs et PSE » qui a eu lieu à Peyresq, en France, du 31 mai au 3 juin 2022. La communication écrite est disponible en ligne via ce lien : [https://e-publish.uliege.be/APL\\_REH\\_RDD/chapter/estimation-rshe/](https://e-publish.uliege.be/APL_REH_RDD/chapter/estimation-rshe/)

### II.3.1 Introduction

L'excès d'azote potentiellement lixiviable constitue l'une des principales sources de pollution des eaux superficielles et souterraines en Europe. L'activité agricole est considérée comme le premier acteur de la pollution azotée diffuse (Mariotti, 1998). C'est pourquoi plusieurs textes réglementaires dont la Directive Nitrate (91/676/CEE), la Directive Cadre sur l'Eau (2000/60/CE) et la directive 2006/118/CE sont parus et ont fixé un seuil de concentration maximale à 50 mgNO<sub>3</sub><sup>-</sup>/L pour les masses d'eau avec une valeur guide de 25 mgNO<sub>3</sub><sup>-</sup>/L.

Le nitrate (NO<sub>3</sub><sup>-</sup>), qui représente au maximum 1% de l'azote du sol, est responsable de la majorité des pollutions azotées dans les eaux de surface et souterraine (Tournebize et al., 2008). De nombreuses actions sont mises en place pour diminuer les concentrations en nitrate en parcelles agricoles telles que le Programme de Gestion Durable de l'Azote en agriculture (PGDA) en Belgique et le Plan de Maitrise des pollutions d'origine Agricole (PMPOA), ou le Plan Azote National (PAN), en France. Aujourd'hui, avec la prise en compte des impacts environnementaux, il est possible pour chaque exploitation agricole de mesurer un reliquat post-récolte afin de quantifier l'azote minéral non utilisée par les cultures et un reliquat sortie d'hiver (RSH) permettant de calculer une quantité plus raisonnée de fertilisants à épandre au printemps (Justes et al., 2013). Dans notre étude, nous nous intéresserons au reliquat entrée hiver (REH) qui correspond à la quantité de nitrate potentiellement lixiviable durant la période hivernale. C'est pendant cette période que s'effectue la recharge des aquifères sous climat tempéré et l'exportation de plus de 80% des flux annuels d'azote en zone de grande culture.

Cependant la mesure des reliquats, correspondant à la quantité disponible de nitrate dans le sol à différentes périodes, est coûteuse et chronophage. En effet, des mesures ponctuelles ne sont pas forcément représentatives dans les zones agricoles très hétérogène. En plus de cette contrainte de l'hétérogénéité spatiale, la période de prélèvement des échantillons du sol reste difficile à prévoir, en particulier pour le REH où il faudrait trouver le moment idéal se situant généralement entre la fin de la minéralisation de l'azote, lorsque les températures sont inférieures à 5°C (Billy, 2008) et le début de l'infiltration de l'eau, après réhumectation du sol.

Un autre moyen de mesure possible pour étudier les transferts de nitrate est la case lysimétrique (Ballif et al., 1996). Sa mise en œuvre, complexe et coûteuse, est souvent réservée aux études expérimentales agronomiques (recherche ou chambre d'agriculture). Une alternative plus pratique à mettre en place serait d'instrumenter l'exutoire des secteurs drainés par tuyaux enterrés. Généralement, la structuration hydraulique des réseaux de drainage accélère le

transfert de l'eau et des polluants permettant ainsi d'approcher le fonctionnement des systèmes lysimétriques géants (Kladivko et al., 1991; Garnier et al., 2022). Le drainage agricole artificiel, par tuyaux enterrés ou fossés à ciel ouvert, permet d'évacuer le surplus des eaux de nappes superficielles hivernales caractéristiques des sols hydromorphes en France. Le drainage a une dimension agronomique car il vise à stabiliser les rendements agricoles face aux contraintes climatiques et pédologiques. Le drainage permet aussi d'avoir un meilleur accès aux champs par les agriculteurs. De plus, cette technique permet de collecter les eaux des parcelles qui débouchent sur un exutoire localisé à l'aval du bassin versant agricole. De ce fait, le système de drainage simplifie les relevés de mesures et nous permet un accès facile aux données de débits et de qualité de l'eau (Arlot, 1999; Tournebize et al., 2008).

Le recours aux outils de modélisation peut constituer une solution viable pour faire face au manque de données. En effet, organiser et maintenir des campagnes de mesures sur le long terme est très complexe. De plus, les données récoltées à l'échelle locale sont souvent peu représentatives du comportement moyen d'un bassin versant agricole. Dans la littérature, plusieurs modèles permettent de quantifier le cycle de l'azote du sol dans les systèmes drainés. Un modèle peut être efficace pour simuler les rendements agricoles (ex. STICS (Brisson et al., 2003), DayCent (Guest et al., 2017)), estimer les valeurs de gaz à effet de serre (ex. DNDC, (Smith et al., 2020)) ou quantifier les exportations de polluants liés aux pratiques agricoles (ex. ADAPT (Gowda et al., 2012), DRAINMOD (Ale et al., 2013), SWAT (Arnold et al., 2012)).

Il existe deux grandes catégories de modèles : (1) les modèles conceptuels où les processus sont simplifiés et peuvent s'appliquer aux grandes échelles et (2) les modèles mécanistes dans lesquels les comportements sont décrits de manière plus fine à l'aide d'équations mathématiques pour des applications locales (Tang et al., 2019). Nous pouvons citer quelques modèles hydrologiques mécanistes comme ADAPT (Gowda et al., 2012), DayCent (Parton et al., 1998) et DRAINMOD-NII (Youssef et al., 2005)) ou conceptuels, intégrant la notion du bilan hydrique comme SWAT (Arnold et al., 2012), STICS (Brisson et al., 2003) et DNDC (Li et al., 1992a, b). Ces modèles conceptuels reposent sur un réservoir sol multicouche ou compartimenté pour représenter le transfert des polluants dans le sol. Cette décomposition spatiale permet de tenir compte de l'hétérogénéité verticale et/ou horizontale mais entraîne le besoin de définir de nombreux paramètres. Ces derniers temps, les modèles conceptuels à paramètres réduits sont de plus en plus développés et utilisés pour simuler le transfert des nitrates dans le sol (Surdyk et al., 2021). Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser plus particulièrement à l'étude de la robustesse du modèle conceptuel de transfert des nitrate NIT-



DRAIN (Chelil et al., 2022a). La robustesse correspond à l'évaluation des performances d'un modèle dans différents contextes spatiotemporels (Coron, 2013; Jeantet et al., 2021).

## II.3.2 Matériels et méthodes

### II.3.2.1 Description des sites d'étude

A l'échelle de la France, les parcelles drainées représentent plus de 10 % de la surface utile agricole (SAU, rapport normalisé ne prenant pas en compte les forêts et les centres urbains) et peut s'étendre jusqu'à 90% dans certaines régions (Kao, 2008; Vincent, 2020). Le réseau de drainage agricole (composé de tuyaux enterrés et/ou de fossés à ciel ouvert) joue le rôle de lysimètre géant, et son exutoire constitue le lieu privilégié pour analyser le transfert des polluants (ex. nitrates). Cette particularité est présente au sein des trois sites sélectionnés dans cette étude (Figure 24), qui de plus ont des superficies contrastées (i.e. Rampillon, 335 ha ; Gobard, 36 ha et La Jaillièrre, 1 ha) et présentent diverses rotations culturales avec comme culture dominante, le blé d'hiver (Figure 25). Il est à noter que le contraste en terme de superficie n'affecte pas le paramétrage du modèle nitrate dès lors que les variables que l'on cherche à expliquer (flux de nitrate, débit de drainage) sont normalisés par unité de surface.

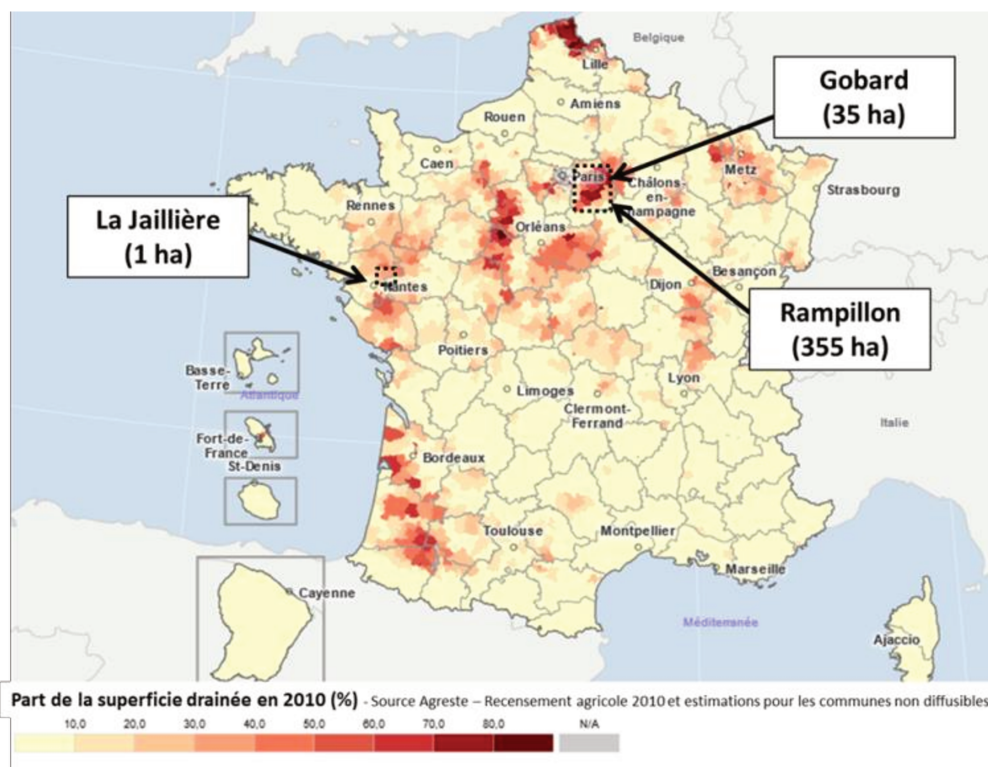


Figure 24: Localisation des sites d'étude et pourcentage de drainage par canton (Agreste, 2010)

La zone de Rampillon correspond à un bassin versant de 355 ha où au moins 95% de la superficie est drainée par un ensemble de tuyaux enterrés puis connectée à un réseau de fossés

à ciel ouvert. Le site de Gobard est composé de plusieurs champs drainés totalisant une superficie de 36 ha où le point de mesure est situé au niveau d'un collecteur (point de connexion de plusieurs drains). Ces deux sites sont localisés au centre du Bassin Parisien, à l'Est de la région parisienne (77). La dernière zone d'étude est la parcelle (P3) du site expérimental de La Jaillière, d'une surface de 1 ha, localisée à l'Ouest de la France, au Sud du Massif Armoricaïn. Le site est géré par ARVALIS (2021) depuis 1987.

La composition minéralogique des sols des trois sites est similaire (limoneuse majoritairement) reposant sur un substratum argileux à *Gobard* et *Rampillon* (Tournebize et al., 2015) ou constitué d'altérites de schistes à *La Jaillière* (Lorre et al., 1994). Ils sont soumis à un climat océanique relativement identique, où ils reçoivent entre 600 et 700 mm/an de pluie pour une température moyenne annuelle de 11°C.

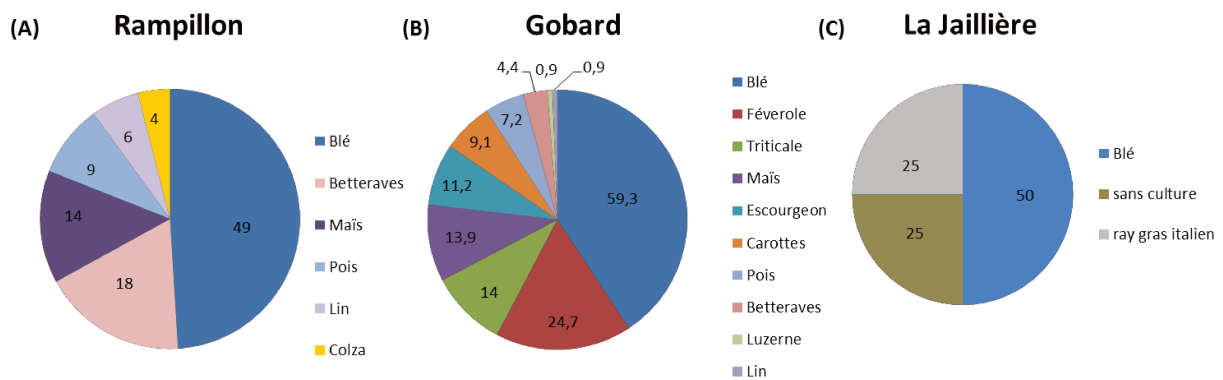


Figure 25: Proportions culturales dans chaque site étudié : (A) Rampillon entre 2014 et 2020 (AQUITBrie, n.d), (B) Gobard entre 2008 et 2012 (ORACLE, 2013) et (C) La Jaillière en 1989, 1990, 1993 et 1994 (ARVALIS, 2021)

### II.3.2.2 Les données utilisées

L'exutoire du bassin versant agricole de Rampillon a été instrumenté pour une acquisition à haute fréquence des données hydrologiques et de qualité de l'eau. Six années de données horaires de débit et de concentration en nitrates (2014-2020) seront exploitées dans le cadre de cette étude. Egalement, les mesures de qualité de l'eau (nitrate) et de débit au pas de temps horaire ont été enregistrées à l'exutoire du réseau de drainage agricole du site de Gobard durant les années hydrologiques allant de 2008 à 2012.

Concernant le site de la Jaillière, les mesures sont souvent partielles et comportent beaucoup de lacunes, nous permettant uniquement d'exploiter les données horaires de débit et de concentration en nitrate correspondants aux quatre saisons hydrologiques : 1989, 1990, 1993 et 1994 (Figure 26). Les trois sites d'étude regroupent au total 14 années de données de débit et de concentration en nitrate qui ont été homogénéisées au pas de temps horaire.

Les débits ont été mesurés soit à l'aide d'une sonde de vitesse (débitmètre Sigma 950, Hach à Rampillon, (Mander et al., 2021)) soit par une sonde mesurant la hauteur d'eau qui est transformée en débit grâce à une courbe de tarage. La hauteur d'eau est mesurée par un capteur Druck PDCR1830 sur le site de Gobard (Tournebize et al., 2015) et V notch Weir à La Jaillière (Henine et al., 2022). Les concentrations en nitrate ont été mesurées à l'aide d'un spectromètre à UV de type *Nitral* à La Jaillière et de type *S::can* sur les deux autres sites.

Les saisons hydrologiques présentent des variations hydroclimatiques (Tableau 8). La lame d'eau drainée cumulée sur une année hydrologique s'étend de 21 mm (*La Jaillière*, 1994) à 369 mm (*Rampillon*, 2017), avec en moyenne des volumes drainés annuels avoisinant les 150 mm. Nous distinguons deux grandes tendances quant aux observations des concentrations en nitrate : une régularité des données sur les sites de grandes superficies avec des concentrations en nitrate moyennes de  $54,2 \pm 3,4$  mg NO<sub>3</sub><sup>-</sup>/L à *Rampillon* et de  $63,6 \pm 6,0$  mg NO<sub>3</sub><sup>-</sup>/L à *Gobard* ; une variabilité prononcée sur le site de La Jaillière, comme le montre l'écart-type très élevé ( $81,9 \pm 64,2$  mg NO<sub>3</sub><sup>-</sup>/L).

Les exportations annuelles de nitrate sont plus importants à La Jaillière (~37 kgN/ha/an) que sur les deux autres sites (ordre de grandeur de 12 à 16 kgN/ha/an). Malgré des années hydrologiques contrastées, les données moyennes sont assez similaires sur les sites pluriparcellaires (*Rampillon* et *Gobard*) alors qu'elles sont plus fluctuantes à La Jaillière.

Il est important de noter que les REH sont mesurés *in situ* sur la parcelle de la Jaillière par prélèvement de sol à la tarière ce qui est fortement représentatif du stock réel de nitrate. A l'inverse, les REH de *Rampillon* et *Gobard* sont déterminés a posteriori en utilisant la base de données de la Chambre d'Agriculture du département Seine et Marne. Cette dernière regroupe un ensemble de mesures de REH obtenues à partir d'analyse de prélèvements de sols de parcelles représentatives des assolements majoritaires du département. En Seine et Marne, 80% de la SAU est cultivée en céréale (ex. blé, maïs, orge) et en oléo-protéagineux (ex. colza, tournesol, pois, soja) dont la culture dominante est le blé (40 %). Les REH sont calculés alors en pondérant la surface de chaque culture présente sur les deux bassins versants d'étude. Ce reliquat pondéré REH<sub>p</sub> ne représente pas un REH parcellaire mais plutôt un REH moyenné sur l'ensemble de la surface du bassin versant.

Tableau 8: Comparaison des valeurs moyennes des concentrations et flux de nitrate (\*\*calculé de septembre à février) ainsi que des REH obtenus après (1) un calage interannuel des paramètres sur chacun des sites et (2) à partir du jeu de paramètres unique moyenné sur les trois sites étudiés. \*L'année 1994 présente des lacunes de suivis du Nitral.

Site	Année	Concentration moyenne (mg NO <sub>3</sub> -/L)			Flux cumulé** (kgN/ha/an)			mm	kgN/ha	
		observée	Simulée (un jeu de paramètres par site)	Simulée (jeu de paramètres moyenné sur l'ensemble des sites)	observée	Simulée (un jeu de paramètres par site)	Simulée (jeu de paramètres moyenné sur l'ensemble des sites)		REH (Mesuré)	REHe (jeu de paramètres moyenné sur l'ensemble des sites)
Rempillon	2014	52.6	52.5	52.5	20.1	19.0	19.1	159	49	56
	2015	57.3	57.2	57.6	8.8	9.5	9.6	62	72	66
	2016	53.6	53.8	54.1	4.8	4.5	4.6	32	78	62
	2017	49.6	49.7	49.7	37.4	38.5	39.4	369	66	60
	2018	57.8	57.8	57.9	4.5	4.5	6.4	46	ND	61
	2019	49.3	49.4	49.4	15.1	16.3	18.2	169	37	52
Gobard	2008	57.3	58.2	56.9	4.6	4.6	4.8	35	68	63
	2009	71.0	71.0	70.7	12.3	11.6	12.1	88	43	81
	2010	65.5	65.3	65.3	16.3	16.7	16.8	164	65	73
	2011	60.4	60.9	60.2	6.2	6.2	6.3	57	75	68
La Jaillière	1989	47.3	47.0	54.9	16.9	23.1	23.1	284	90	63
	1990	170.2	176.5	200.1	44.7	43.2	43.3	135	228	212
	1993	86.1	81.6	94.8	49.3	45.9	54.4	339	ND	112
	1994*	23.9	23.0	25.7	0.44	0.71	0.79	21	29	27

### II.3.2.3 Stratégie d'évaluation de la robustesse du modèle

L'analyse de la robustesse du modèle est réalisée sur les trois sites d'étude. Ainsi, les paramètres du modèle NIT-DRAIN (Chelil et al., 2022a) sont estimés en utilisant la méthode d'optimisation GRG (Generalized Reduced Gradient; Lasdon et al. (1978)). Un critère de performance objectif est généralement introduit dans l'optique de réduire l'écart entre les simulations et les observations. Cela permet d'obtenir un jeu de paramètres optimal et des simulations de qualité sur la période de simulation considérée. La calibration nécessite aussi l'estimation du stock initial de nitrate disponible pour la lixiviation. Ainsi, le modèle intègre la notion du reliquat entrée hiver équivalent (REHe) qui correspond à une estimation moyenne et annuelle du stock d'azote disponible pour la lixiviation en période des premières pluies

hivernales. Ces valeurs de reliquat sont ensuite comparées avec les REH mesurés sur chacun des sites d'étude et suivant les trois stratégies d'évaluation de la robustesse décrites ci-dessous.

La méthode d'évaluation de la robustesse du modèle inclut trois principales étapes (Figure 26):

1. Un calage annuel des paramètres où l'on procède à l'optimisation du critère de performance année par année afin d'étudier la variabilité interannuelle des paramètres.
2. Un calage interannuel dit « global » des paramètres en prenant en considération la période totale d'observation sur chaque site d'étude.
3. La validation d'un jeu de paramètres unique, en prenant en compte la moyenne des valeurs de paramètres issus du calage interannuel effectué sur les trois sites d'étude. Ce jeu de paramètres générique (unique) est supposé être représentatif des caractéristiques pédologiques et hydrologiques de l'ensemble des sites. Dès lors, seules les valeurs de REHe sont estimées. Le but est de vérifier que la qualité des simulations de nitrate et les performances associées suite à la considération d'un jeu de paramètres générique (unique) sont préservées.

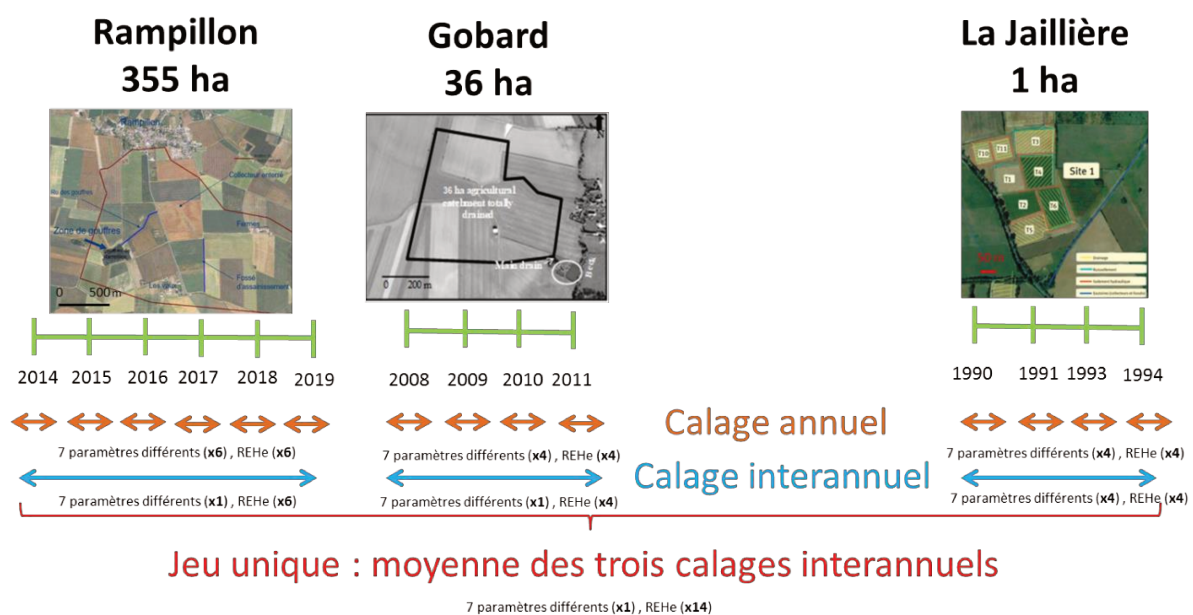


Figure 26: En haut nous proposons une vue aérienne des sites : Rampillon (Tournebize et al., 2017), Gobard (Tournebize et al., 2015) et La Jaillière (ARVALIS, 2021) et en bas de la figure, un schéma qui montre la stratégie de calage du modèle NIT-DRAIN permettant de vérifier sa robustesse spatiotemporelle

### II.3.2.4 Critères d'évaluation des performances du modèle

Le critère de performance utilisé pour calibrer les paramètres du modèle est celui du NSE, Nash and Sutcliffe Efficiency (Nash and Sutcliffe, 1970) dont la formule est la suivante :

$$NSE = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - X^*_i)^2}{\sum_{i=1}^n (X^*_i - \bar{X}^*)^2} \quad (\text{II.19})$$

Avec  $X_i$  comme étant la variable simulée à un pas de temps  $i$ ,  $X^*_i$  la variable observée à un pas de temps  $i$  et  $\bar{X}^*$  la valeur moyenne de la variable observée sur l'ensemble de la période.

Ce critère objectif est fréquemment utilisé pour vérifier la qualité des simulations hydrologiques mais sous-estime la variance, ce qui a été corrigé suite au développement récent du critère KGE, Kling-Gupta Efficiency (Gupta et al., 2009).

$$KGE = 1 - \sqrt{(r - 1)^2 + (\varepsilon - 1)^2 + (\Delta - 1)^2} \quad (\text{II.20})$$

$r$  correspond à la corrélation linéaire existante entre les observations et les simulations,  $\varepsilon$  la variabilité relative et  $\Delta$  le biais constaté entre les moyennes des données simulés et observés.

Un cas idéal de modélisation correspond à une superposition parfaite des données simulées aux observations. Dans ce cas, la valeur du critère de performance (NSE, KGE) est égale à 1. Moins la modélisation est de qualité, plus leurs valeurs diminuent et tendent vers  $-\infty$ . Le NSE sera utilisé en tant qu'un critère de performance principal pour optimiser les valeurs des concentrations en nitrate. La qualité des flux de nitrate simulés est évaluée en utilisant les deux critères (NSE et KGE).

### II.3.3 Résultats

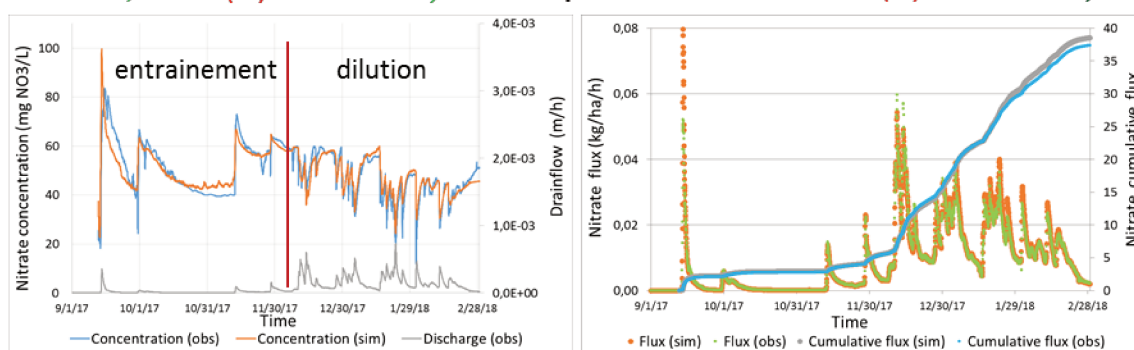
#### II.3.3.1 La robustesse du modèle

##### II.3.3.1.1 Vers un jeu de paramètres générique

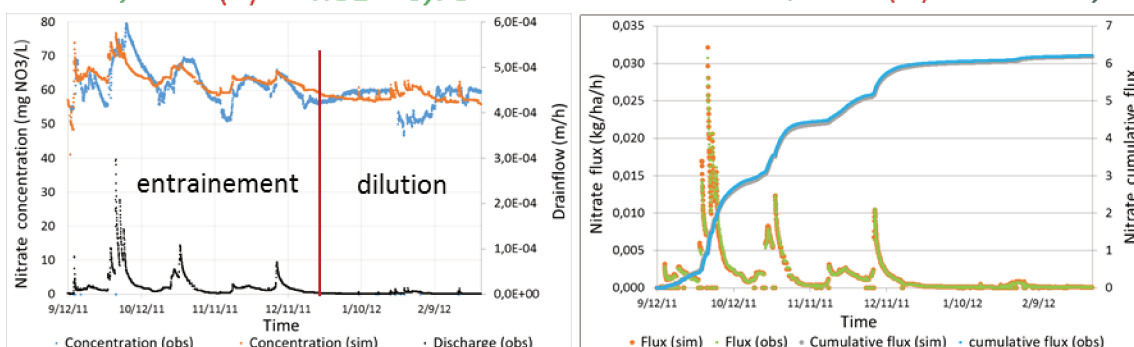
La stratégie d'évaluation de la robustesse du modèle NIT-DRAIN vise à étudier la possibilité de définir un jeu de paramètres unique et représentatif de l'hydrologie des systèmes agricoles drainées sous l'influence d'un climat océanique tempéré. En premier lieu, un calage interannuel des paramètres est appliqué sur toute la période des données des trois sites d'étude. Il permettra de générer trois jeux de paramètres et un ensemble de valeurs annuelles de REHe. Ensuite, un jeu de paramètres unique (générique) est calculé en considérant la moyenne arithmétique des valeurs de paramètres représentatives à chaque site d'étude.

Les observations et simulations au pas de temps horaires des flux et des concentrations en nitrates ainsi que les cumuls des flux de nitrate obtenus suite au calage interannuel des paramètres par site d'étude sont illustrées dans la *Figure 27*. Nous avons sélectionné des années hétérogènes en terme de bilan hydrique et présentant des comportements de transfert des nitrates contrastés afin de donner davantage de fiabilité à nos résultats.

**NSE = 0,72 (A) KGE = 0,77 Rampillon NSE = 0,96 (B) KGE = 0,97**



**NSE = 0,65 (C) KGE = 0,73 Gobard NSE = 0,99 (D) KGE = 0,98**



**NSE = 0,82 (E) KGE = 0,90 La Jaillière NSE = 0,89 (F) KGE = 0,94**

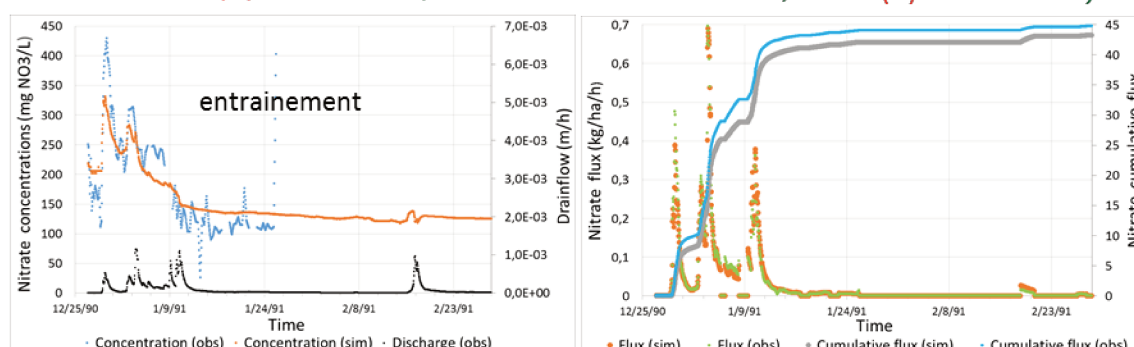


Figure 27: Comparaison des concentrations (A, C, E) et des flux de nitrate (B, D, F) observés et simulés par le modèle NIT-DRAIN obtenues suite au calage interannuel des paramètres sur les années hydrologiques 2017-2018 (Rampillon ; A, B), 2011-2012 (Gobard ;C, D), 1990-1991 (La Jaillière ;E, F)

Nous remarquons que les flux de nitrate sont très bien simulés. En effet, la dynamique des exportations est respectée et les critères de performance élevés ( $NSE \geq 0,89$  et  $KGE \geq 0,94$ ) confirment la très bonne qualité des simulations. Egalement, les concentrations en nitrate sont bien reproduites ( $NSE \geq 0,65$  et  $KGE \geq 0,73$ ). Les phénomènes d'entraînement et de dilution des nitrates sont bien décrites, notamment sur le site de Rampillon où nous pouvons remarquer un entrainement marqué des nitrates en début de la saison hydrologique lorsque le sol est chargé d'azote potentiellement lixiviable. Contrairement à la dynamique des concentrations en nitrate sur le site de Rampillon, seul le phénomène d'entraînement est observé à La Jaillière durant l'année hydrologique 1990-1991 (considérée comme une année plutôt sèche). Il est à noter que

les concentrations moyennes enregistrées durant cette saison sont remarquablement élevées (170,2 mgNO<sub>3</sub><sup>-</sup>/L).

De plus, un écart réduit est observé entre les cumuls de flux de nitrate mesurés et simulés (Figure 27, Tableau 8) ce qui valide la capacité du modèle à reproduire avec une bonne précision les exportations annuelles des nitrates vers les milieux naturels.

L'existence d'une corrélation linéaire positive entre les observations et les simulations des concentrations et flux de nitrate met en avant la capacité du modèle NIT-DRAIN à correctement reproduire leurs dynamiques horaires (Figure 28).

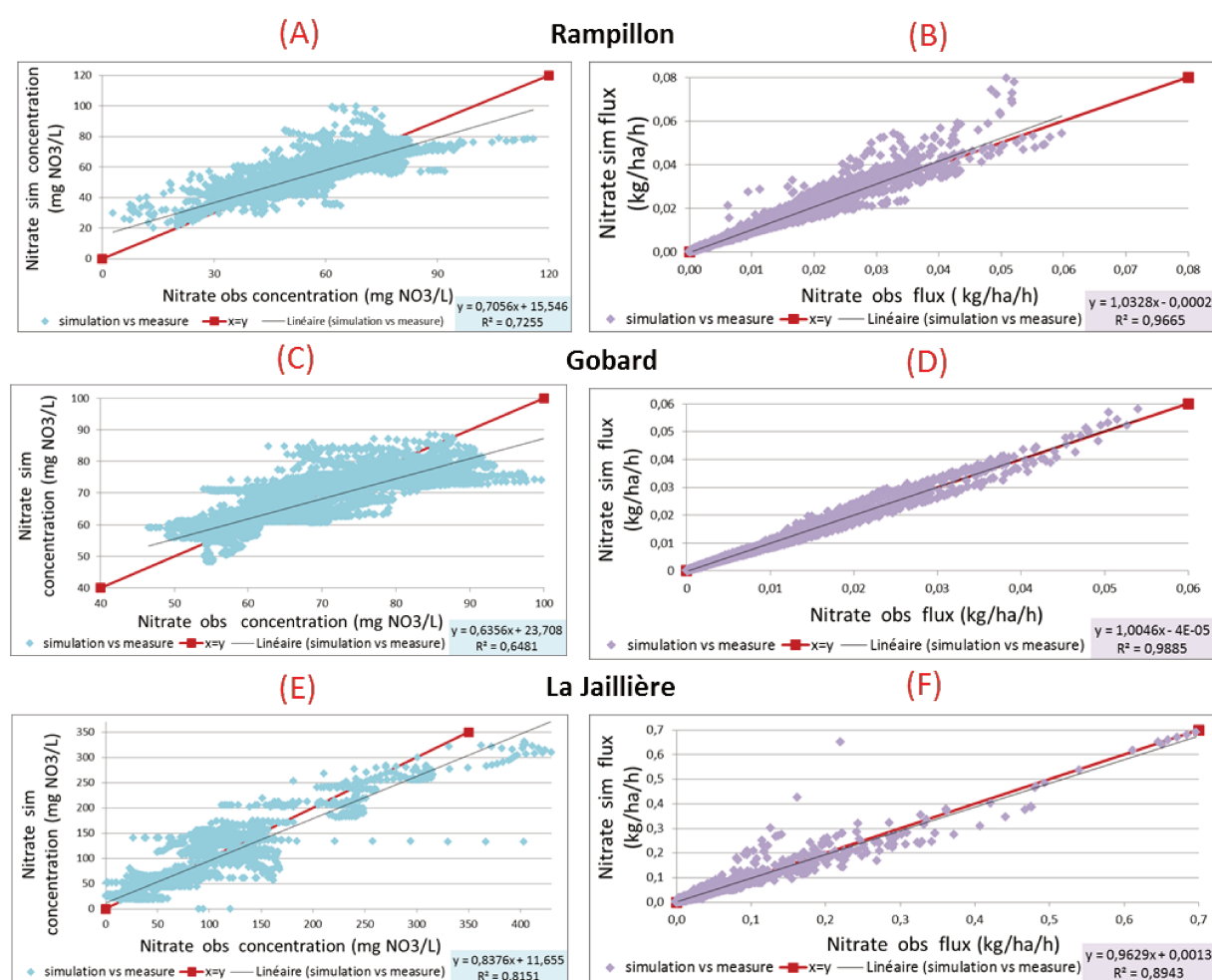


Figure 28: Corrélation entre les valeurs observées et simulées des concentrations (A, C, E) et des flux (B, D, F) de nitrate issues des calages interannuels des paramètres effectués pour chaque site : Rampillon (A, B), Gobard (C, D) et La Jaillière (E, F)

Les exportations observées et simulées des nitrates présentent des coefficients de corrélations ( $R^2$ ) supérieurs à 0.89. A l'inverse, les simulations et observations de concentrations en nitrate sont bien corrélées ( $R^2 > 0.64$ ) mais présentent une surestimation et une sous-estimation des



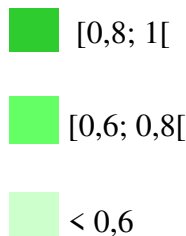
faibles et fortes valeurs, respectivement. Cela est d'autant plus marqué pour les groupes de parcelles agricoles de Gobard et Rampillon.

Le remplacement de l'ensemble des jeux de paramètres calibrés sur chaque site (Rampillon, Gobard et La Jaillière) par un jeu de paramètres générique impacte très légèrement les performances du modèles et la qualité des simulations.

Le Tableau 9 classe les performances (NSE, KGE) des simulations de flux et de concentration en nitrate pour chacun des sites étudiés suivant la stratégie de calage des paramètres d'entrée du modèle. Nous pouvons observer que les performances obtenues sont meilleures en flux ( $\geq 0,83$ ) qu'en concentrations en nitrate ( $\geq 0,50$ ). Ces performances pourraient dépendre aussi de la stratégie de calage. En général, nous observons que les performances les plus élevées sont obtenues lors des calages interannuels des paramètres.

La qualité des simulations de flux et de la concentration en nitrate est très légèrement impactée suite à la prise en compte d'un jeu de paramètres générique à l'ensemble des sites étudiés (moyenne des valeurs de paramètres calibrés sur toute la période des données par site d'étude). Cette légère perte de performance est considérée comme acceptable étant donné la préservation de la dynamique des concentrations en nitrate et le faible impact sur les exportations de flux (Tableau 8).

Tableau 9: Récapitulatif des critères de performance obtenus sur chaque site et suivant les trois stratégies de calage

site	stratégie de calage	performance				
		Concentrations		Flux		
		NSE	KGE	NSE	KGE	
Rampillon	calage annuel (moyenne)	0.77	0.81	0.83	0.86	
	calage interannuel	0.72	0.77	0.96	0.97	
	jeu de paramètres unique	0.64	0.50	0.93	0.92	
Gobard	calage annuel (moyenne)	0.60	0.73	0.99	0.97	
	calage interannuel	0.65	0.73	0.99	0.98	
	jeu de paramètres unique	0.56	0.78	0.99	0.98	
La Jaillière	calage annuel (moyenne)	0.71	0.79	0.83	0.86	
	calage interannuel	0.82	0.90	0.89	0.94	
	jeu de paramètres unique	0.64	0.50	0.93	0.91	

### II.3.3.1.2 Variabilité annuelle des paramètres

Les variabilités obtenues suite à l'optimisation annuelle des paramètres du modèle sont illustrées par les boîtes à moustache (Figure 29).

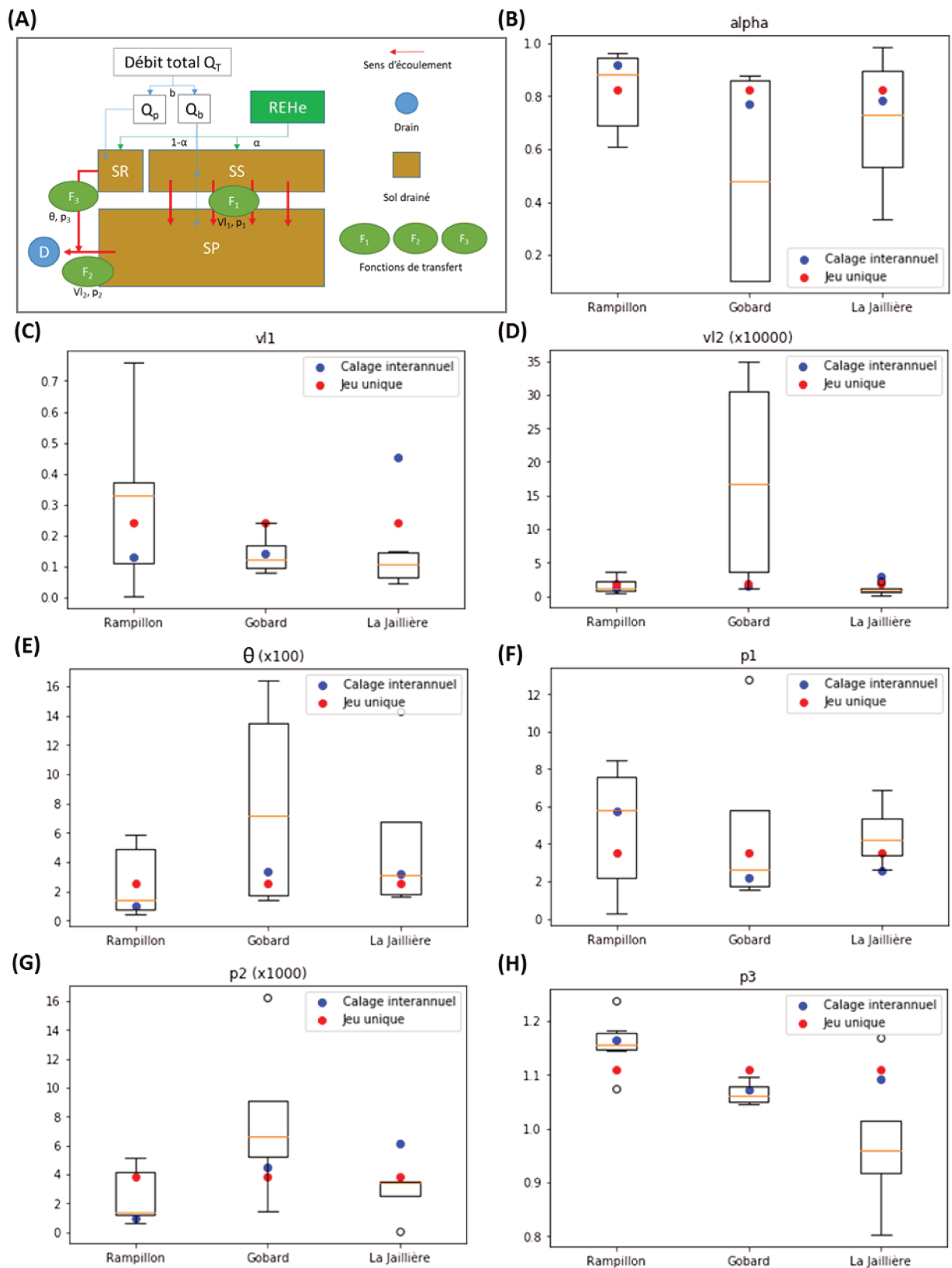


Figure 29: Schéma récapitulatif des paramètres estimés par le modèle NIT-DRAIN (A) suivant les différentes stratégies de calage. Les boîtes à moustache correspondent aux variabilités annuelles des paramètres alpha (B),  $v_{l1}$  (C),  $v_{l2}$  (D),  $v_{l3}$  (E),  $p_1$  (F),  $p_2$  (G) et  $p_3$  (H). Les points bleus et rouges correspondent aux valeurs de paramètre issues du calage interannuel et au jeu de paramètres unique, respectivement

Nous pouvons noter la présence d'une variabilité marquée des paramètres notamment sur le site de Gobard. Cela est généralement dû à l'occurrence des phénomènes d'équifinalité (lorsque plusieurs combinaisons de paramètres génèrent des simulations similaires) mais aussi à cause du contraste interannuel visible sur les données de concentrations en nitrate et du débit. En effet, les données observées concentrent une forte variabilité et des dynamiques événementielles hétérogènes d'une année hydrologique à une autre (Tableau 8).

A l'inverse, les valeurs des paramètres optimisés suivant la stratégie de calage interannuelle présentent moins de variabilité d'un site à un autre. La valeur du paramètre  $\alpha$ , responsable du partage du stock d'azote initial entre les deux réservoirs superficiels, peut être fixée à 0.8. Ainsi, 80% du stock initial d'azote alimentera le réservoir SS tandis que les 20% restants alimenteront le réservoir SR. Également, les paramètres intégrés aux équations de transfert des nitrates des deux réservoirs (superficiel rapide (SR) et profond lent (SP)) vers le drain, présentent des valeurs stables. Il est à noter que les valeurs de ces paramètres doivent être rigoureusement attribuées du fait de leur contribution explicite au flux total exporté et donc à la concentration en nitrate simulée à la sortie du système de drainage.

### **II.3.3.2 Qualité des REH estimés**

Intéressons-nous maintenant à la qualité des REH équivalents (estimés par le modèle). Les REHe présentés dans la Figure 30 ont été estimés suivant la stratégie de calage interannuel des paramètres (barres oranges) et à partir d'un jeu de paramètres unique représentatif des trois sites étudiés (barres grises).

Les REHe estimés par le modèle sont comparables avec les REH mesurés (faibles écarts en général  $< 10$  kgN/ha). Nous remarquons que les REHe sont bien estimés sur les sites de Rampillon et Gobard en se basant sur le jeu de paramètre unique (ex. années 2014, 2015, 2017 et 2019 ; Rampillon, et les saisons 2008, 2010 et 2011 ; Gobard). Seules les années 2016 à Rampillon et 2009 à Gobard présentent une meilleure estimation des REHe en calibrant les paramètres sur l'ensemble de la période d'étude (calage interannuel). De plus, le calage interannuel des paramètres permet des estimations plus précises de REHe sur l'ensemble des années hydrologiques du site de La Jaillière.

En plus de la robustesse des paramètres constatée suite à leur calage sur les trois sites d'étude (Figure 29), les valeurs de REHe sont correctement estimés ce qui renforce la fiabilité des hypothèses de fonctionnement du modèle et sa structure décrites dans le chapitre précédent.

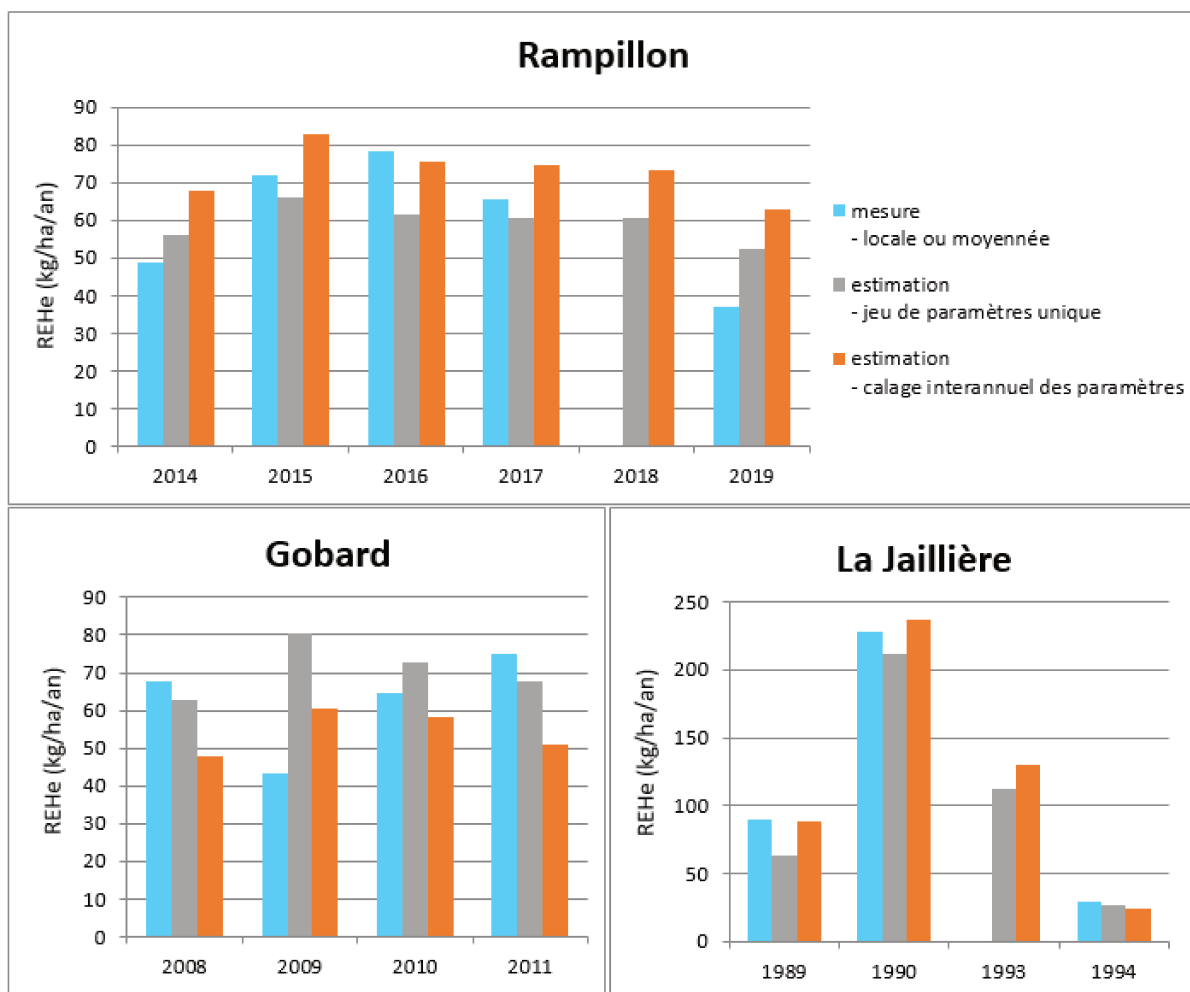


Figure 30: Comparaison des REH mesurés (bleu) avec les REH estimés suivant un calage interannuel des paramètres (orange) et à partir du jeu de paramètres unique (gris) sur chacun des sites étudiés

### II.3.4 Discussion et conclusions

Les résultats de cette étude sur la modélisation simplifiée des transferts de nitrate en parcelles drainées valident l'hypothèse que les REH pilotent les exportations de nitrate sur la période s'étalant du début de la saison hivernale jusqu'aux débuts des fertilisations printanières (à partir du 1<sup>er</sup> mars). Dès lors, nous pouvons considérer que durant la saison de drainage, le modèle permet d'expliquer la majeure partie des exportations de nitrate du sol en se basant principalement sur les mécanismes de transfert sans prendre en compte les processus biogéochimiques. Le modèle conceptuel NIT-DRAIN fait intervenir peu de paramètres à calibrer et ne nécessite que le débit de drainage observé ou simulé (par exemple à partir du modèle de simulation du drainage SIDRA-RU, (Henine et al., 2022)) et des valeurs annuelles de REHe comme données d'entrées.

Les simulations obtenues affichent de très bonnes performances où les critères objectifs sont très proches de leurs valeurs optimales pour les flux. Dans la littérature, d'autres modèles de

transfert de nitrate proposent des performances similaires (Youssef and al, 2005; Lindström et al., 2010; Ale et al., 2013). L'originalité du modèle NIT-DRAIN est la proposition, en plus des flux, d'une bonne simulation des concentrations en nitrate. En effet, Moriasi et al. (2015) précise que des valeurs de NSE supérieures à 0,35 peuvent être considérées comme satisfaisantes lorsqu'il s'agit des simulations de concentration en nitrate. Des performances élevées correspondants à des valeurs de NSE et KGE supérieurs à 0,5 ont pu être obtenues avec le modèle NIT-DRAIN indépendamment de la stratégie de calage utilisée. Ces performances sont très rarement atteintes dans la littérature (Beaudoin et al., 2021).

Dans ce chapitre de thèse, nous nous sommes intéressés en particulier à l'étude de la robustesse spatiotemporelle du modèle NIT-DRAIN sous différents contextes. L'un des objectifs de cette approche de modélisation, simple et parcimonieuse en termes de paramètres d'entrée, est de proposer des valeurs de paramètres génériques et représentatives de l'ensemble des sites drainées en France. De plus, NIT-DRAIN est conçu pour permettre l'estimation du reliquat azoté en entrée d'hiver, conceptualisé par un stock initial des nitrates dans le sol au début de la saison de drainage (REHe) sans avoir à le mesurer à la parcelle. Cela nécessite un minimum de données d'entrées à savoir les débits observés ou encore la pluie et l'évapotranspiration potentielle (ETP) en cas de couplage avec un modèle conceptuel de drainage (ex. SIDRA-RU) qui permettrait de s'affranchir des observations de débit.

L'étude de la variabilité interannuelle des paramètres du modèle NIT-DRAIN a montré la stabilité d'une bonne partie de leurs valeurs indépendamment de la stratégie de calage utilisée. Cependant, une partie des paramètres présente une variabilité annuelle prononcée. Ce gradient peut s'expliquer par l'hétérogénéité des saisons hydrologiques étudiées. Lorsque la qualité des simulations n'est pas impactée, la source principale de la variabilité des paramètres pourrait être attribuée à l'équifinalité. Ce phénomène est principalement dû aux interactions et compensations possibles entre les différents paramètres du modèle. Nous avons remarqué l'occurrence des problèmes d'équifinalité pour les couples de paramètres ( $v_{l1}$ ,  $p_1$ ) qui sont chacun reliés à la quantité du transfert de nitrate depuis le réservoir superficiel lent (SS). Cette équifinalité des paramètres est moins fréquente lors des calages de ces derniers sur une fenêtre temporelle plus large (interannuelle). En effet, un nombre de mesures plus important associé à la diversité des saisons hydrologiques réduit le nombre de combinaison possible des paramètres. Pour résumer, l'utilisation des paramètres calibrés sur l'ensemble de la période de données permet de réduire l'occurrence des problèmes d'équifinalité tout en préservant la qualité des estimations du REHe pour chacun des sites étudiés.

L'évaluation de la robustesse spatiale et temporelle du modèle NIT-DRAIN montre qu'il est possible d'estimer avec une bonne précision le reliquat entrée hiver équivalent (REHe). Ce dernier est présenté, dans cette étude, comme un indicateur de pression azotée. Le modèle génère, à partir d'une chronique de débit (observé ou simulé), des simulations de flux et de concentration en nitrate au pas de temps horaire. Le nombre relativement faible des paramètres confère au modèle une simplicité de prise en main sans remettre en question son efficacité. Dans les exemples cités, le modèle simule correctement l'évolution des concentrations en nitrate tout en considérant les phénomènes d'entraînement et de dilution. Nous nous sommes intéressé au calage des paramètres sur l'ensemble de la période de mesures pour chaque site d'étude. Cela permet de rechercher des jeux de paramètres représentatifs pour chaque site regroupant toutes les années de mesure exploitables. Un jeu de paramètre générique (jeu unique), équivalent à la moyenne des valeurs de paramètres calibrés sur une fenêtre temporelle interannuelle génère de très bonnes performances de simulation des concentrations en nitrate sur l'ensemble des sites étudiés.

Ainsi, le choix d'un jeu de paramètres unique et générique conduit à des performances de modélisation très correctes et à des REHe estimés très prometteurs, ce qui confirme la robustesse spatiale du modèle indépendamment des gradients de superficie, de la multitude des rotations agricoles mises en place et de la diversité des années hydrologiques.

Indépendamment de la robustesse avérée de NIT-DRAIN que nous avons constaté en se basant sur les données des trois sites d'étude, il serait judicieux d'évaluer les performances du modèle sous d'autres contextes pédoclimatiques. Notons à titre d'exemple l'importance des valeurs des paramètres géométriques d'un modèle de simulation des débits de drainage comme SIDRA-RU (ex. écartement et profondeur des drains). De la même manière, l'influence de la géométrie du drainage sur le transfert des nitrates devrait être étudiée.

## Conclusion de la partie II

---

Le besoin d'une meilleure description du transfert des nitrates en milieu agricole artificiellement drainé nous a poussé à développer un nouveau modèle conceptuel simple et robuste nommé « NIT-DRAIN ». Ainsi, les premières étapes de développement du modèle, sa validation sur des données de terrain et l'étude de sa robustesse spatiotemporelle ont constitué cette deuxième partie du manuscrit.

Parmi les différentes approches de modélisation que l'on a pu tester, celle composée de trois compartiments permet une description minutieuse des transferts hétérogènes du nitrate dans le sol (Chelil et al., 2022a). Dès lors, la version finale du modèle est composée de trois compartiments conceptuels stockant chacun une quantité de nitrate bien déterminée. Les deux compartiments loin du drain sont connectés en série et permettent le transfert lent et progressif du nitrate tandis que le compartiment proche du drain caractérise le transfert rapide du nitrate vers le drain.

A partir d'un jeu de données d'entrée réduit (paramètres, débit de drainage, REHe) et d'une nouvelle approche conceptuelle décrivant les deux types de transfert des nitrates (entraînement, dilution), nous avons pu construire un modèle compartimenté permettant (1) de générer des simulations de concentration en nitrate de qualité et (2) d'obtenir des estimations correctes des reliquats azotés entrée hiver (REH).

La version finale du modèle NIT-DRAIN a été validée sur un jeu de données horaires de concentration en nitrate. Ces dernières ont été mesurées à l'exutoire du bassin versant agricole artificiellement drainé de Rampillon (355 ha). Ainsi, de très bonnes performances de simulation des concentrations en nitrate ont été obtenues malgré l'existence d'un contraste météorologique interannuel.

De plus, l'approche de modélisation retenue apporte des éléments complémentaires quant au fonctionnement hydraulique du drainage agricole. En effet, nous avons pu constater l'existence d'un lien empirique entre la date de démarrage de la saison de drainage intense (SDI) et celle qui correspond au remplacement des phénomènes d'entraînement par les phénomènes de dilution des nitrates. Dès lors, la date du début de la SDI pourrait être identifiée par le biais de la modélisation conceptuelle NIT-DRAIN. Ce résultat est davantage discuté dans la partie IV section 2.1.

En analysant la robustesse du modèle avec les données collectées sur les trois bassins versants agricoles étudiés, nous avons pu démontrer l'existence d'un jeu de paramètre moyen et générique. Il est à noter qu'en plus de leur contraste de superficie, les parcelles agricoles étudiées sont situées dans deux localisations éloignées, proposant deux situations climatiques différentes.

Enfin, la validation du modèle sur différents sites confirme l'ensemble des hypothèses émises pour construire notre approche de modélisation. Parmi ces hypothèses, nous avons restreint la simulation des concentrations en nitrate à la période hivernale comprise entre le mois de septembre et février. En effet, nous avons supposé que l'épuisement progressif d'un stock d'azote initial disponible pour la lixiviation (REHe) suffit pour décrire le transfert des nitrates durant cette période hivernale. En période printanière, il serait donc nécessaire de prendre en considération l'apport de la fertilisation et des principaux processus de transformation biogéochimique (ex. dénitrification, assimilation par la plante, minéralisation) qui deviennent majoritaires en cette période de l'année. Cela serait possible en intégrant un module agronomique à NIT-DRAIN ou en implémentant une technique d'assimilation de données au modèle afin d'estimer la variation du stock du nitrate dans le sol. L'assimilation de données devrait permettre l'estimation de la variation temporelle du stock de nitrate à partir des données de débit de drainage et des observations de concentration en nitrate.



## **Partie III - Assimilation de données variationnelle, application aux modèles de transfert de l'eau et de l'azote en contexte de drainage agricole**

---

Cette troisième partie de la thèse regroupera les travaux d'assimilation de données variationnelle implémentés aux modèles de simulation du débit de drainage (SIDRA-RU) et des concentrations en nitrate (NIT-DRAIN) en milieu agricole artificiellement drainé.

Dans un premier temps, nous allons argumenter le choix de l'assimilation de données variationnelle. Puis, nous présenterons le principe de fonctionnement de cette méthode en introduction des deux chapitres qui forment cette 3<sup>ème</sup> partie du manuscrit de thèse.

En effet, le premier chapitre présentera l'implémentation de l'assimilation de données variationnelle et hybride (Bayésienne-Variationnelle) au modèle de simulation de drainage (SIDRA-RU). Le but recherché est d'améliorer puis de stabiliser l'estimation des paramètres d'entrée du modèle.

Le deuxième chapitre vise à explorer la plus-value derrière l'implémentation de la méthode d'assimilation de données variationnelle au modèle de transfert des nitrates (NIT-DRAIN). Ainsi, nous proposons d'analyser principalement l'impact de la fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrate sur les estimations du reliquat entrée hiver équivalent (REHe). Ensuite, l'assimilation variationnelle des concentrations en nitrate sera configurée pour estimer l'évolution horaire du stock des nitrates dans le sol.

### **Contexte général**

Durant le dernier siècle, les chercheurs et ingénieurs en modélisation ont focalisé leur effort sur le développement de modèles aussi robustes que possible pour représenter fidèlement le système étudié. En général, les modèles numériques proposent une configuration classique comprenant des entrées, une structure et des sorties (Figure 31). Le "problème direct" ou "simulation directe" nous permet de simuler l'état d'un système (sorties du modèle) à partir d'informations d'entrées qui décrivent l'état initial, aux limites et différentes variables caractérisant l'environnement du système.

Avec l'élargissement des champs d'application de ces modèles et la diminution des observations disponibles, de nombreux chercheurs se sont focalisés pendant les dernières décennies sur les "problèmes inverses", qui permettent d'estimer les entrées des modèles, souvent inconnues ou entachées d'erreurs, à partir des observations disponibles tout en prenant en compte leurs incertitudes.

Dans le domaine des géophysiques, les approches qui permettent de résoudre les problèmes inverses sont communément nommées : méthodes "d'assimilation de données". Diverses approches ont été proposées, on peut distinguer 1) le filtre de Kalman et ses variantes ensemblistes, méthode largement utilisée dont l'une des premières applications est associée à la mission Apollo et au guidage de la navette vers la lune dans les années 1960 ; 2) les méthodes variationnelles connues à travers les deux approches 3D-Var et 4D-Var, optées par les météorologistes grâce à leur robustesse et précision pour résoudre des systèmes opérationnels de prévision du temps ; 3) les filtres particuliers connus sous le nom de méthodes de Monte-Carlo qui offrent des alternatives plus sophistiquées pour des contextes de grande complexité mais avec une dimension limitée. Toutes ces approches visent à trouver une estimation optimale des variables d'intérêt tout en prenant en compte leurs incertitudes de façon stable et robuste. Pour ce faire, elles combinent toute source d'information disponible, provenant d'observation, d'information à priori, de dynamique du modèle et des représentations des erreurs.

### **La méthode d'assimilation de données variationnelle (4D-Var)**

Soit  $U$  un vecteur de contrôle qui regroupe les différents paramètres et variables d'entrée d'un modèle numérique  $M$ . Les sorties du modèle  $X$  s'obtiennent classiquement en exécutant le modèle  $M(U)$  (problème direct). Afin d'évaluer la qualité des simulations, ces sorties sont généralement comparées aux observations  $X^*$  lorsqu'elles sont disponibles.

Par le biais de l'assimilation de données variationnelle, on cherche à réduire l'écart entre les observations  $X^*$  et les simulations  $X$  en définissant une fonction coût  $J$  :

$$J(U) = \frac{1}{2} \left\| R^{-\frac{1}{2}}(M(U) - X^*) \right\|^2 + \frac{1}{2} \left\| B^{-\frac{1}{2}}(U - U_b) \right\|^2 \quad (\text{III.1})$$

Cette fonction combine la contribution des observations et des informations à priori ( $U_b$ ), toutes les deux pondérées par leurs erreurs respectives qui sont prises en compte par les matrices de covariance des erreurs  $R$  et  $B$ . La minimisation de  $J$  permet donc d'assimiler les informations contenues dans ces sources de données afin d'aboutir à une estimation optimale. Pour ce faire, les approches variationnelles se basent sur le calcul du gradient qui fait intervenir le modèle linéaire tangent et l'adjoint du modèle étudié. Ces deux composantes constituent la force des approches variationnelles grâce à deux intégrations directe et inverse permettant ainsi de propager l'influence d'une observation dans le passé et le futur et donc une assimilation optimale de son information dans le processus d'estimation. Afin d'identifier le minimum de cette fonction via le gradient, plusieurs méthodes d'optimisation existent tel que les familles des méthodes quasi-Newton, du gradient conjugué, etc.

En effet, l'implémentation de l'assimilation de données variationnelle nécessite la disponibilité du code adjoint qui peut s'avérer, dans certains cas, difficile à générer manuellement. Cependant, l'existence des outils de différentiation automatique comme TAPENADE (Hascoet and Pascual, 2013) et OpenAD (Utke et al., 2008) ont grandement simplifié l'acquisition du code adjoint, notamment pour les modèles proposant des structures complexes. Il est tout à fait possible de faire face à un modèle non-différentiable dans sa forme d'origine. Cependant, cette contrainte pourrait être résolue en apportant quelques modifications au code source du modèle. Il est à noter que les modèles SIDRA-RU et NIT-DRAIN sont naturellement différentiables.

Le schéma d'assimilation de données variationnelle illustré par la *Figure 31* nécessite l'application d'un algorithme automatique d'optimisation comme celui faisant partie de la famille des méthodes numériques quasi-Newton qui se base sur le gradient BFGS et ses versions de mémoire limitée avec contrainte LBFGS-B.

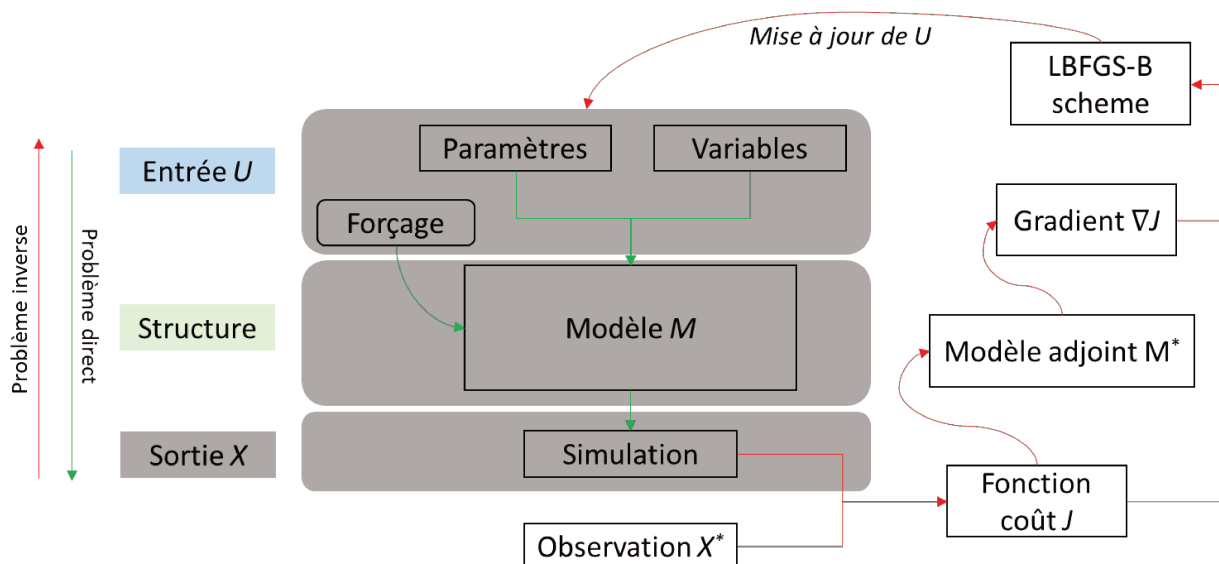


Figure 31: Schéma simplifié explicitant le fonctionnement du 4D-Var sur un cas de modélisation conceptuelle

L'ensemble des méthodes d'assimilation de données (AD) peuvent théoriquement être implémentées peu importe la configuration et le type du modèle considéré. Cependant, quelques spécificités techniques en relation avec l'objectif de la modélisation et la complexité de la structure du modèle aiguillent généralement vers un choix d'une méthode d'AD optimale.

Dans notre contexte, le choix de la méthode s'est orienté naturellement vers l'AD variationnelle. En effet, l'utilisation de l'assimilation de données variationnelle est plus appropriée dans le cas où on s'intéresse à l'estimation des paramètres d'entrée de grande dimension (spatiale ou temporelle), sous réserve de disponibilité du code adjoint au modèle.

Les modèles conceptuels souffrent, en général, des problèmes d'équifinalité. Cela est souvent le cas en présence d'un nombre important de paramètres (Her and Chaubey, 2015) ou en absence d'une bonne définition des limites de variation de ces derniers (Dunn, 1999). Les méthodes d'assimilation de données variationnelle tout comme les méthodes de filtrage (ex. filtre particulaire) ne permettent pas de résoudre le problème d'équifinalité pour autant.

Dans un contexte où les incertitudes sont fortes laissant apparaître les problèmes d'équifinalité, identifier une solution unique devient un challenge. Il est donc plus approprié de combiner des approches qui se complètent pour gagner en stabilité tout en gardant une précision satisfaisante. En effet, l'approche variationnelle est déterministe et propose une solution qui correspond au "mode" ainsi qu'une bonne représentation des variations des variables inconnues. La solution mode n'est pas stable en cas de présence de minimums locaux. Les approches bayésiennes, proposent une solution "moyenne" en balayant un ensemble de solutions pondérées, ce qui offre une solution stable mais moins précise. Une combinaison des deux permet de gagner mieux en stabilité et en précision.

Le choix de l'assimilation de données variationnelle (4D-Var) au détriment d'une méthode de filtrage, comme celle de Kalman, est principalement dû à la disponibilité (sous réserve d'une bonne expertise) des codes adjoints relatifs aux deux modèles de drainage considérés. Dans notre étude, nous nous intéressons particulièrement à des questions liées à l'estimation des paramètres et variables d'entrée des modèles de drainage SIDRA-RU et NIT-DRAIN. En effet, les paramètres du modèle SIDRA-RU, de type scalaire, doivent être représentatifs de l'ensemble de la période assimilée. De plus, la structure du modèle NIT-DRAIN requière l'estimation annuelle de la variable d'entrée : REHe. Finalement, l'application de la VDA sera facilitée dans le cadre d'un potentiel futur couplage des deux modèles NIT-DRAIN et SIDRA-RU du moment où leurs adjoints correspondants sont disponibles. De ce fait, le calcul rapide et précis du gradient de la fonction coût, notamment lorsque les entrées évoluent le temps, conforte notre choix de l'AD-Var pour une potentielle application aux modèles de simulation de drainage (SIDRA-RU) et de transfert des nitrates (NIT-DRAIN).

L'approche variationnelle présente un avantage considérable par rapport aux méthodes séquentielles puisqu'elle fournit une estimation des paramètres après avoir assimilé toutes les observations disponibles. Cela permet de prendre en compte l'intégralité de leur contribution suite à leur estimation sur une large fenêtre d'assimilation. A l'inverse, les méthodes

séquentielles incorporent les informations de chaque observation séquentiellement dans l'estimation, ce qui peut finalement engendrer une perte d'information significative.

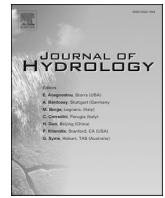
Finalement, la détermination du code adjoint nous permet non seulement d'avoir un accès à l'assimilation de données variationnelle mais aussi de pouvoir mettre en place une analyse de sensibilité locale et/ou globale par la méthode de l'adjoint afin de déterminer l'impact des entrées sur les sorties des modèles considérés. Ces approches sont réputées pour leur rapidité d'exécution et l'exactitude de leurs estimations notamment en présence de peu de variables en sortie du modèle et d'un jeu de paramètres d'entrée important.

## **Chapitre III.1 : L'assimilation de données variationnelle pour améliorer les paramètres d'entrée d'un modèle de drainage agricole**

---

Ce chapitre est rédigé sous forme d'article scientifique. Il a été accepté par la revue « Journal of Hydrology » le 25 mai 2022 et publié dans sa version définitive durant le mois de juillet.

L'article en question aborde la problématique de la stabilité des estimations des paramètres d'entrée du modèle de simulation du drainage « SIDRA-RU ». Tout d'abord, nous proposons d'identifier les paramètres présentant le plus d'impact sur la dynamique des débits simulés via une analyse de sensibilité globale et locale par la méthode de l'adjoint. Ensuite, nous implémenterons les méthodes d'assimilation de données variationnelle et hybride (variationnelle-bayésienne) dans le but d'améliorer la stabilité des paramètres du modèle et systématiquement la qualité des simulations du débit.



## Research papers

# Variational data assimilation to improve subsurface drainage model parameters

Samy Chelil<sup>a,\*</sup>, Hind Oubanas<sup>b</sup>, Hocine Henine<sup>a</sup>, Igor Gejadze<sup>b</sup>, Pierre Olivier Malaterre<sup>b</sup>, Julien Tournéize<sup>a</sup>

<sup>a</sup> University of Paris-Saclay, INRAE Jouy-en-Josas - Antony, UR HYCAR, Antony, France

<sup>b</sup> G-EAU, Univ Montpellier, AgroParisTech, BRGM, CIRAD, IRD, INRAE, Institut Agro, Montpellier, France



## ARTICLE INFO

This manuscript was handled by Andras Barossy, Editor-in-Chief, with the assistance of Saman Razavi, Associate Editor

## Keywords:

Agricultural drainage model  
Adjoint sensitivity analysis  
Variational data assimilation  
Bayesian estimation

## ABSTRACT

Variational data assimilation (VDA) has been implemented to enhance the estimation of the unknown input parameters of a new agricultural subsurface drainage model (SIDRA-RU) through assimilating drainage discharge observations. The adjoint model of SIDRA-RU has been successfully generated through the generic automatic differentiation tool (TAPENADE). First, the adjoint model is used to explore the local and global adjoint sensitivities of the valuable function defined over the drainage discharge simulations with respect to model input parameters. Next, the most influential parameters are estimated by applying the Variational DA approach. The performed sensitivity analysis shows that the most influential parameters on drainage discharge are those controlling the dynamics of the water table; the second most influential parameters manage the drainflow start of each drainage season. Compared to an alternative gradient-free calibration performance, the estimation of these governing parameters by the variational method improves the overall quality of the drainage discharge prediction, in particular in terms of the cumulative water volume. Improved parameters generate less than 5 mm (1%) of the discrepancy between simulated and observed water volumes, based on the five years of daily discharge observations on the Chantemerle agricultural parcels (36 ha). Preliminary numerical tests have shown the potential presence of multiple local minima, thus pointing out the equifinality issues. The latter can be highlighted by the self-compensation of both the physical soil parameters and the main conceptual parameters. For improving the robustness of the parameter estimates, a novel hybrid “Bayesian Variational” method is suggested. This method is based on the Bayesian averaging of an ensemble of optimal estimates.

## 1. Introduction

Agricultural drainage systems are designed to remove the excess water within soils subjected to frequent and continuous waterlogging, in particular during the winter season. The agricultural subsurface drained areas contribute to 10% of French arable soils (Vincent, 2020). The main objectives of agricultural drainage are to ensure better crop yields (Mohtadullah, 1990) and facilitate grazing and access to cultivated fields by farmers. Subsurface drainage flow only occurs when the perched water table rises above the drain depth, as identified by “drainage season”. Three drainage patterns can be distinguished during an agricultural drainage season (Lesaffre, 1988): (1) the “pre-flow drainage stage”, consists of a gradual saturation of the soil and a limited flow into drains; (2) the “intensive drainage stage” (IDS) featuring a continuous and rapid reaction to each rainfall event; (3) the “drying

stage”. The latter is characterized by the water flow decrease until the drainage flow stops during summer.

The hydrological behavior of agricultural drainage networks is highly dependent on hydrometeorological data and soil hydro-physical properties. To understand the hydrology of drained agricultural lands, several numerical models have been developed to approximate the underlying dynamics and physical processes. The appropriate modeling of the perched water table formed in drained soils is complex, time-consuming and still require multiple input data and parameters. In contrast, some simplified models simulate the outputs from a limited input dataset but are not able to describe the physics of hydrological and hydraulic processes (Tournéize et al., 2004; Henine et al., 2010; Henine et al., 2014).

Several models are reported in the literature (Gurovich and Oyarce, 2015) for designing drainage networks and monitoring hydraulic

\* Corresponding author.

E-mail addresses: [samy.chelil@inrae.fr](mailto:samy.chelil@inrae.fr) (S. Chelil), [julien.tourneize@inrae.fr](mailto:julien.tourneize@inrae.fr) (J. Tournéize).

patterns. DRAINMOD (Skaggs et al., 2012), EnDrain (Valipour, 2012), CSUID (Alzraiee et al., 2013), and SIDRA that was initially developed at INRAE (formerly Cemagref) by Lesaffre (1988) describe the hydrological and hydraulic behavior of drained agricultural lands. More specifically, SIDRA (Simulation of DRAINage) model simulates water table variations at the mid-drain and calculates discharge at the drainage network outlet. Since that time, several model improvements have been proposed by Bouarfa (1995) and Bouarfa and Zimmer (2000), including a better consideration of the evaporation term and the water table shape. Recently, a new conceptual module has been introduced to manage the quantity of water seeping through the vadose soil zone (Jeantet et al., 2021; Henine et al., 2022), referred to as SIDRA-RU (RU “Réserve Utile” for Water Holding Capacity).

Furthermore, the model uncertainty management is indispensable to enhance the hydrological prediction (Blöschl et al., 2019). Leaving out the structural uncertainty specific to each model, one can focus on improving the input/parameter estimation. This could be achieved in part by considering the most suitable optimization approach in terms of uniqueness, robustness and stability of the final solution.

It is known that long-term discharge predictions are needed to adapt and prepare agricultural lands to cope with the effects of climate change (Jiang et al., 2020; Golmohammadi et al., 2021). Unlike the short-range predictions (e.g. days, weeks), which may require the knowledge of the hydrological state at the beginning of the prediction window (e.g. flood forecasting), the long-range predictions are almost fully defined by the driving conditions (anticipated rainfall and evapotranspiration) and the model parameters. That is why this paper focuses on solving a classical parameter estimation (calibration) problem for SIDRA-RU model, using observations of drainage discharge recorded before the prediction window.

First, the most influential model parameters on model outputs should be identified. This can be achieved through the Sensitivity Analysis (SA), a key preliminary step to the optimization exercise (Stange et al., 2000; Migliaccio and Chaubey, 2005; Razavi et al., 2021). Several approaches can be employed in local and global SA, including variance-based approaches (Sobol, 1993; Saltelli, 2002) and derivative-based methods (Cacuci, 1981; Morris, 1991). The adjoint sensitivity analysis involves a simultaneous computation of all sensitivities using adjoint operators within a single model run. In addition, inequality links have been established between the derivative-based global sensitivity measures (DGSM) and Sobol’s indices, thus yielding SA for a large number of input parameters (Kucherenko, 2009; Lamboni et al., 2013). In the same context, Gejadze et al. (2019) derived a generalized relationship between the global sensitivity indices and the Polynomial Chaos coefficients, making SA suitable for high-dimensional models.

Once the most influential parameters are identified, one can estimate their values using the available observations. Several approaches are presently available, ranging from the PAP-GR Michel’s calibration algorithm (Michel, 1989) highlighted by Mathevet (2005), to more sophisticated Data Assimilation (DA) methods, such as the Kalman filter and its ensemble variants, Particle filters, variational Data Assimilation (VDA) and hybrid methods (Abbaszadeh et al., 2019).

In particular, VDA method is preferred in operational geophysical large-scale applications, due to its scalability, robustness and potential to handle nonlinear systems under high uncertainty (Courtier et al., 1998; Fischer et al., 2005; Gauthier et al., 2007). However, references on the application of VDA to hydrological models remain relatively scarce. In recent studies, the optimal estimates of the unknown model variables and/or parameters have been obtained via minimization of a cost function using the gradient-based methods (Nguyen et al., 2016; Oubanas et al., 2018; Ghorbanidehno et al., 2020; Jay-Allemand et al., 2020). This procedure requires developing the adjoint counterpart of the model, which could be challenging to obtain in some cases (e.g. presence of non-differentiable operators). Application of filtering methods is natural for solving the state or state-parameter estimation problems to enable the short and medium range state forecasting. For the pure

calibration problems the ‘full sample’ data processing approach such as VDA should be preferred, given the adjoint model is available.

A common issue when solving ill-posed problems in a variational formulation using the gradient-based minimization is the likely presence of multiple local minima in the cost function (Dennis et al., 1977). A comparison between different optimization algorithms applied to hydrological models was presented by Arsenault et al. (2014). Some of these methods can be highly sensitive to the choice of the initial guess, known as the “background” in DA or the “prior” in statistics. This finding was supported by Pan and Wu (1998), in which an original approach based on the simplex method was used to reveal and avoid the convergence to local minima. Furthermore, Skahill and Doherty (2006) proposed a simple methodology to address the local minima issue. Based on a local search algorithm, their methodology consists of starting the minimization process with different parameter values to increase the probability of reaching the global minima. The same concept has been deployed when calibrating 3D morphodynamic model data (Shoarinezhad et al., 2020) using the PEST parameter estimation package (Welter et al., 2012), thus showing that the optimization process is substantially affected by the local minima issue.

However, the presence of multiple local minima is, essentially, a sign of ill-posedness in terms of non-uniqueness (equifinality thesis, Beven (2006)). In these circumstances, one should look for the mean of the posterior distribution rather than for one of its modes. The posterior mean is a natural output of the Bayesian methods. Since the direct use of these methods may be difficult in high dimensions, we suggest a simple hybrid approach referred below as the Bayesian Variational (BV) method. That is, the mean is computed over an ensemble of parameter estimates obtained by the variational method, whereas each ensemble member is weighed by the corresponding likelihood. The method is described in detail in Section 2.4.2.

## 2. Materials and methods

This paper focuses on improving the long-range predictive performance of the SIDRA-RU model (Henine et al., 2022) that runs with a daily time step and requires knowledge of the rainfall, potential evapotranspiration and a set of model parameters. First, the adjoint local and global sensitivity analysis are performed, in accordance with the methodologies presented in Goutal et al. (2018) and Gejadze et al. (2019). Next, the VDA method is applied to improve the estimation of the most influential model parameters. Therefore, the uniqueness (equifinality) of the parameter estimation problem is investigated by running the ensemble of minimizations from different starting points. Then, the hybrid BV method is performed to improve the robustness of the estimates. A flowchart is embedded below to indicate the connections between the methodology elements (Fig. 1).

### 2.1. Study area description and data

The Chantemerle agricultural sub-catchment (36 ha) has been considered for this study. The field includes a set of artificially drained agricultural parcels. On average, the drains are laid at a depth of 0.9 m and spaced by 10 to 12 m. The study area is located in Aulnoy (“*Seine et Marne*” department; 70 km east of Paris), within the Orgeval catchment (Tallec (2012); Fig. 2).

The study site experiments are operated by the GIS-ORACLE research observatory (<https://gisoracle.inrae.fr/>). The soil is luvisol type (FAO, 2006; Tournebize et al., 2015) with a silty texture (mixture of sand and clay), which is belong to the Aqualf suborder following the US taxonomy system. This type of soil gives rise to a temporary water table, causing fast and continuous water flows during wet periods. The outlet of the subsurface drainage network has been monitored by the water level measurement device (SE-200 OTT). Then, the water level has been transformed into discharge value using calibrated rating curve. The rainfall has been measured near the study site using a rain gauge. Daily



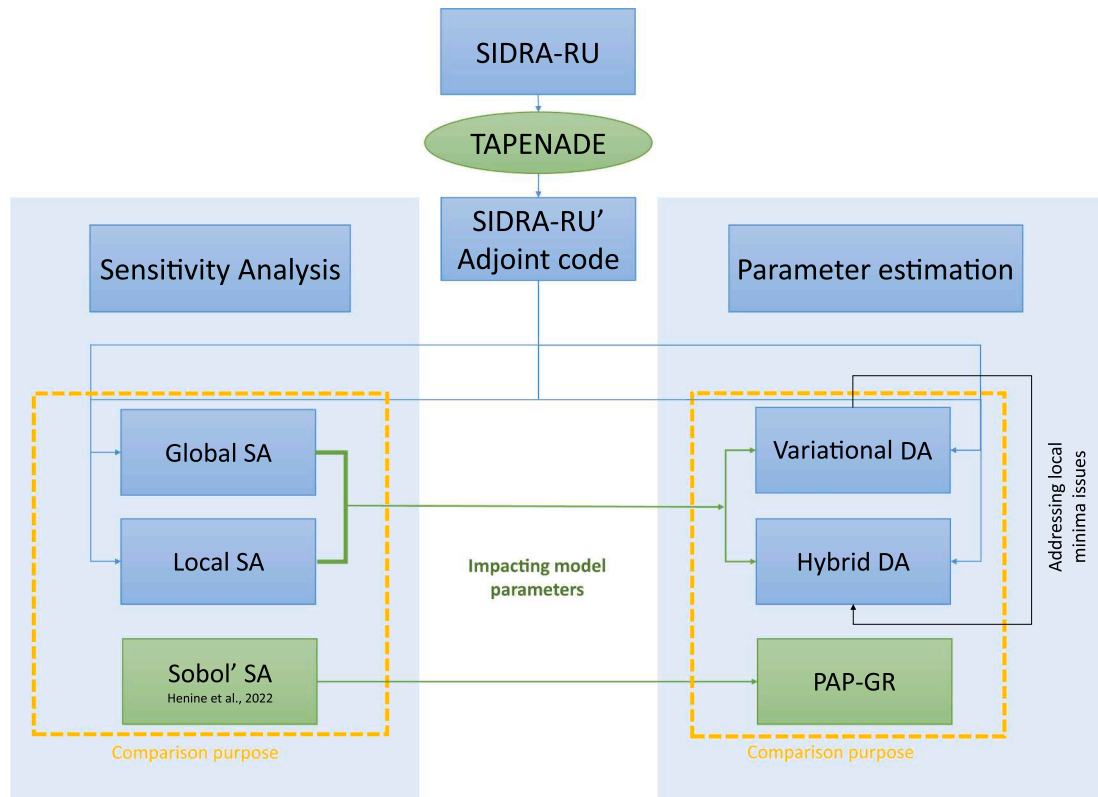


Fig. 1. A flowchart clarifying connections existing between the methodology elements.

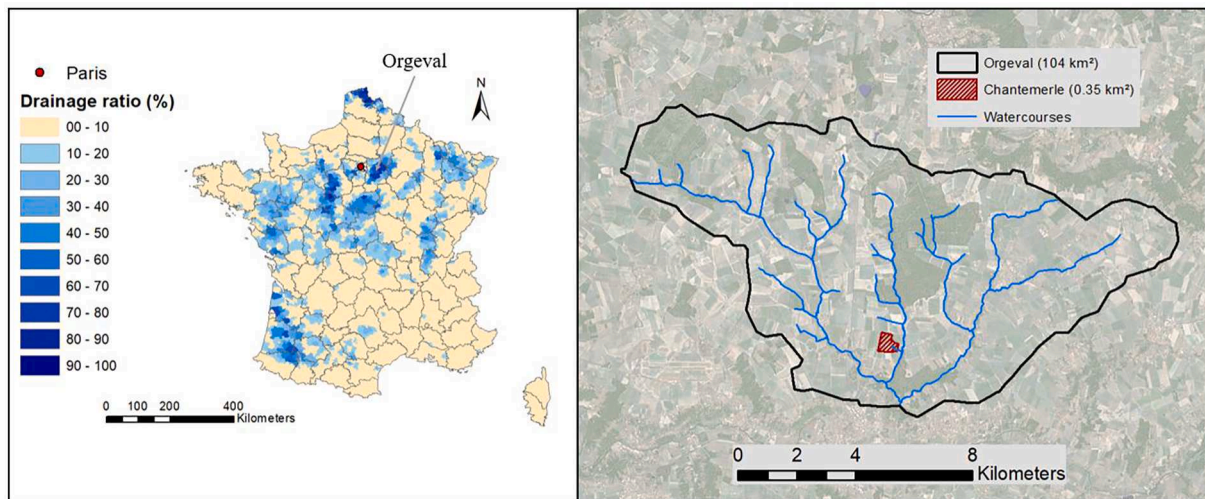


Fig. 2. The “Chantemerle” agricultural field and its general location (48°50’ N, 3° 6’ E), “Seine et Marne department”, France).

potential evapotranspiration (PET) data have been extracted from the SAFRAN database (Vidal et al., 2010). PET values have been calculated according to the Penman-Monteith formula. Available data cover September 1st, 2008 to August 31st, 2013 (Fig. 3).

Among all recorded data, two wet hydrological years, 2010/2011 and 2012/2013 can be distinguished, accumulating respectively 172 mm and 217 mm of drained water. The three remaining dry years account for a combined 209 mm, nearly equal to the drained water accumulated in just a single wet season. This contrast in the quantity of drained water (i.e. succession of dry and wet seasons) lends more reliability to our results.

## 2.2. The SIDRA-RU model

SIDRA-RU is a semi-analytical and semi-conceptual model, which is run at the scale of agricultural plots with a daily time step. The model is based on three coupled modules (Fig. 4; Henine et al. (2022)):

- The first module estimates the net infiltration based on more realistic evapotranspiration, referred to herein as corrected evapotranspiration (CET). This variable takes into account the potential evapotranspiration rate (PET), the available soil water content in the soil reservoir, and the crop coefficient ( $\beta$ ). The net infiltration is

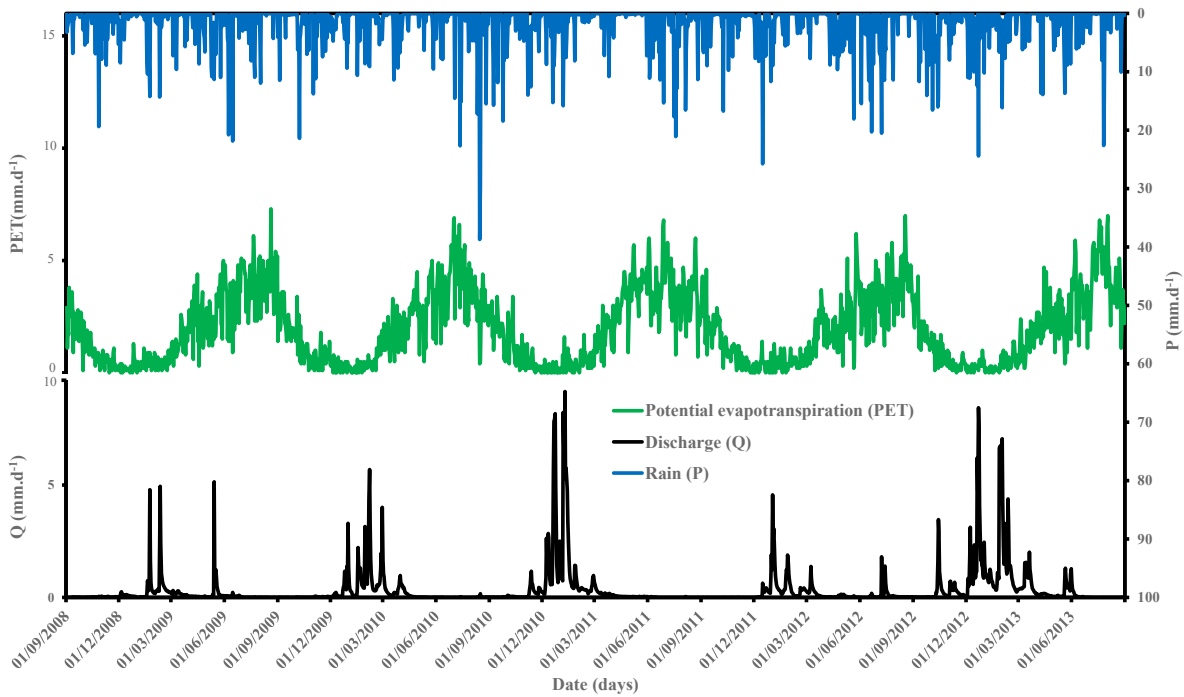


Fig. 3. Five years (2008–2013) of daily drainage discharge data (Q, black) and rainfall (P, blue) recorded at the “Chantemerle” field scale. The related daily potential evapotranspiration values (PET, green) are extracted from the SAFRAN database. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

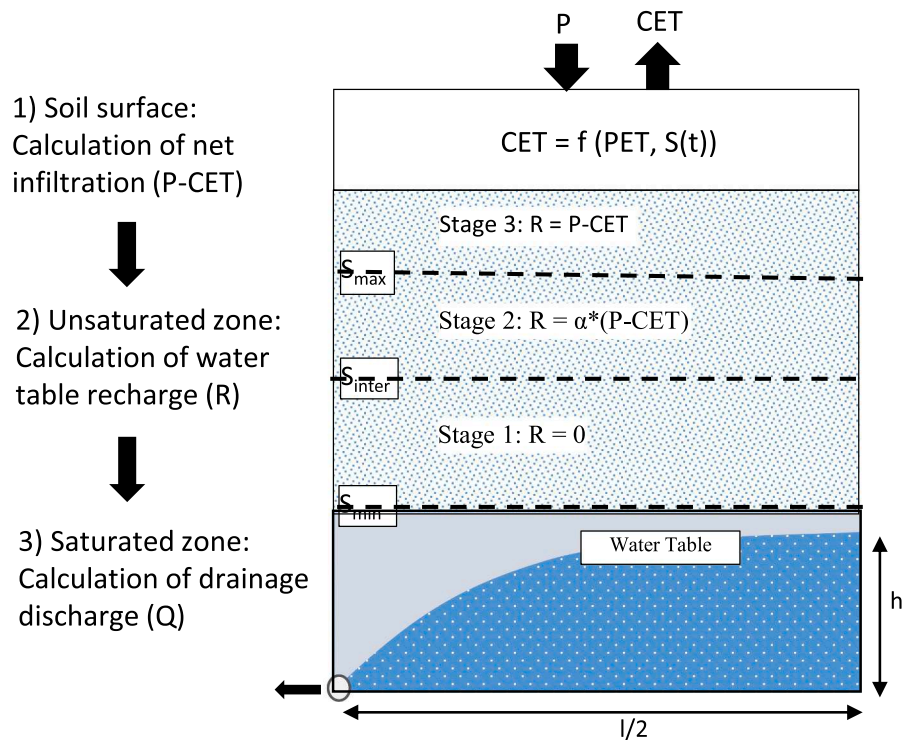


Fig. 4. Diagram presenting the three SIDRA-RU modules (Henine et al., 2022).

calculated as the difference between the precipitation (P) and the CET (Appendix A; formulas A.1).

- Based on a conceptual reservoir approach, the second module calculates the net recharge to the perched water table as a function of the actual water level in the soil reservoir (S(t)). Three distinct soil

reservoir thresholds are accordingly defined namely minimum ( $S_{min}$ ), intermediate ( $S_{inter}$ ) and maximum ( $S_{max}$ ). When  $S(t)$  lies between  $S_{inter}$  and  $S_{max}$ , the model splits the net infiltration rate into two components via partition parameter ( $\alpha$ ). The first part ( $\alpha$ ) recharges the water table (R) while the second part ( $1-\alpha$ ) continues to

fill the soil reservoir. When  $S(t)$  reaches the maximum level ( $S_{max}$ ), the entire net infiltration recharges the water table (Appendix A; formulas A.2). It is worthwhile to note that  $S(t)$  level at the beginning of the hydrological year ( $N$ ) is based on the soil saturation degree of the year ( $N-1$ ).

- The third module simulates drainage discharge ( $Q$ ) and the mid-drain water table height ( $h$ ) above drain by applying the SIDRA model (Lesaffre, 1988). Note that  $Q$  and  $h$  values are calculated considering the Hooghoudt equation (Hooghoudt, 1940) (Appendix A; formulas A.3).

SIDRA-RU inputs are precipitation ( $P$ ) and potential evapotranspiration data ( $PET$ ), both considered as forcing variables, along with the model parameters to simulate the mid-drain water level variations ( $h$ ) and drainage discharges ( $Q$ ) outputs (Fig. 4). The model contains two state variables  $h(t)$  and  $S(t)$ , and eleven parameters.

The parameter set of the model is listed in Table 1. This set includes the SIDRA model parameters ( $K_{sat}$  and  $\mu$ ) and the two soil reservoir parameters, i.e., intermediate soil reservoir level ( $S_{inter}$ ) and reservoir storage capacity during the intensive drainage season ( $SSDI$ ) which is equal to the difference between  $S_{max}$  and  $S_{inter}$ . The remaining parameters are considered as either given invariants, regardless of field characteristics, or typical invariant characteristics at the field scale. It should be pointed out that the presence of an impermeable layer, on which the drains are laid, limits deep infiltrations (aspect not considered herein). In addition, Augeard et al. (2005) showed that surface runoff becomes negligible under the same field conditions since the agricultural plots are being extensively drained, which leads to infrequent soil overflow.

### 2.3. Adjoint sensitivity analysis

In addition to the climate data of rainfall and potential evapotranspiration, SIDRA-RU features 11 input parameters (Table 1), some of which are difficult to assess directly, such as SIDRA and soil reservoir parameters. In order to reveal the most important parameters to be estimated, a sensitivity analysis (SA) is initially performed. Next, the chosen parameters form the control vector to be estimated using the data assimilation method (see Section 2.4).

The present paper investigates both local and global adjoint sensitivities. The latter are computed using the derivative-based approaches involving the SIDRA-RU adjoint model to evaluate the gradient of a valuable function  $J$ , defined over the model response. Note that the formulation of  $J$  depends on the purpose of the study.

The adjoint model is generated using the automatic differentiation (AD) tool TAPENADE (Hascoet and Pascual, 2013), developed at Inria

**Table 1**  
Classification of SIDRA-RU parameters.

Type	Parameters	Unit	Notes
SIDRA model	Saturated hydraulic conductivity ( $K_{sat}$ )	m/day	Measurable but often inaccessible
	Drainage porosity ( $\mu$ )	(-)	
	Water table shape coefficients (A and C)	(-)	Fixed model parameters
Drainage design	Parcels area (S)	m <sup>2</sup>	Values usually known and dependent on the studied field
	Drain spacing (l)	m	
	Drain depth (P)	m	
Evapotranspiration correction	Crop coefficient ( $\beta$ )	(-)	Internal parameters
Soil reservoir	Water share coefficient ( $\alpha$ )	(-)	Not measurable at the field scale
	Intermediate threshold ( $S_{inter}$ )	mm	
	Reservoir storage capacity (SSDI)	mm	

(<https://team.inria.fr/ecuador/en/tapenade/>). The AD engine processes the Fortran code which implements the mapping from the model inputs to the valuable function  $J(U)$ . For the AD procedure to succeed, one has to ensure that all operators of the code are differentiable. This is not always the case, especially with conceptual models. For example, the flow routing scheme originally used in AIGA model (described in Jay-Allemand et al. (2020)) was not differentiable. Since the need for a more accurate routing scheme was obvious, the new one has been developed taking into account the differentiability requirement. Concerning SIDRA-RU model, a brief inspection of the model equations (see Appendix A) shows that it is conditionally differentiable. Here, ‘conditionally’ means that all parameters are explicitly involved inside the continuous operators, so the gradient with respect to all parameters does exist. However, some parameters and state variable  $S(t)$  are involved as arguments in the logical expressions (if-then/elseif-then/endif), which are not differentiable. This means that the computed gradient is approximate since it does not include the component associated to the unaccounted graphs. In practice, this component is usually quite small in comparison to the explicit component and, therefore, does not affect the minimization result significantly. To check this, any logical expression can be substituted with the numerical one using the logistic function  $H(x) = 1/(1 + e^{-2kx})$ , where  $k$  is a big enough real. Since the exponent is a computationally expensive function, one has to keep a compromise between the gradient accuracy and the computational cost in the modified version of the code. Concerning SIDRA-RU model, no modifications have been considered as necessary.

#### 2.3.1. Local adjoint sensitivity analysis (LASA)

Let us consider a model  $M$  that transforms input vector  $I$  into model output vector  $X$ :

$$M(I) = X \tag{1}$$

In the particular case of the SIDRA-RU model, input vector  $I$  includes the vector of parameters  $U_i$  and the climate forcing datasets (i.e. rainfall and potential evapotranspiration):

$$I = \{P(t), PET(t), U\} \tag{2}$$

In this study, rainfall  $P$  and evapotranspiration  $PET$  are considered to be known with high accuracy; thus, their values are not estimated. The input parameters vector  $U$  is defined as follows:

$$U = \{S, l, K_{sat}, \mu, A, C, P, S_{inter}, SSDI, \alpha, \beta\} \tag{3}$$

Where:  $SSDI = S_{max} - S_{inter}$ .

The model response  $X$  represents the simulated temporal evolution of drainage discharge  $Q$ :

$$X = Q(t) \ t \in [0, T] \tag{4}$$

Since in the current SA framework the model output is directly and completely observed, no observation operator is required, and the corresponding observations are hereafter denoted  $X^*$ .

In the local SA context, the sensitivity of the model response with respect to inputs is quantified locally around a given point. Since the true value of  $U$  is unknown, it is typically substituted by a prior  $U_b$ , where index ‘b’ stands for the ‘background’ information in DA. Reasonable initial guess of  $U$  can be provided by an expert evaluation or through introducing a pre-calibration step.

Adjoint SA method computes the sensitivity of the model response  $X$  with respect to the model inputs  $U$  via the gradient of the valuable function  $J(X(U)) := J(U)$  at the point  $U_b$  (background value):

$$\frac{\partial J(U_b)}{\partial U} = \left( \frac{\partial J(U_b)}{\partial U_1}, \dots, \frac{\partial J(U_b)}{\partial U_n} \right) \tag{5}$$

All components of the gradient are computed simultaneously using a single adjoint model run, which is the main advantage of the adjoint approach as compared to the finite-difference or statistical methods.

Moreover, the derivative obtained is exact (up to the machine accuracy, if all operators involved are differentiable), rather than a finite-difference approximation.

Next, the gradient components must be properly scaled to construct the local sensitivities meaningful in terms of the Analysis of Variance (ANOVA) approach. Let us consider a Gaussian perturbation  $\xi \in N(0, B)$ , where  $B = \text{diag}(\sigma_i^2)$ ,  $i = 1, \dots, N$  and  $\sigma_i$  is the standard deviation. It can be seen that:

$$\text{Var}[J] = E[(J(U_b + \xi) - J(U_b))^2] = \sum_{i=1}^N \left( \sigma_i \frac{\partial J(U_b)}{\partial U_i} \right)^2 \quad (6)$$

It follows from the above formula that each component of the gradient  $\partial J(U_b)/\partial(U_i)$  has to be scaled by the corresponding  $\sigma_i$ .

In this study, the Kling-Gupta Efficiency (KGE, Gupta et al. (2009)) has been chosen as a valuable function  $J(U)$ . KGE is widely used to assess the performance of hydrological models and improve simulation quality (Pechlivanidis et al., 2011; Patil and Stieglitz, 2015; Haas et al., 2016; Santos, 2018). The KGE metric ranges from  $-\infty$  to 1, where 1 corresponds to the best match between simulations and observations.

$$J(X, X^*) = 1 - \sqrt{(r-1)^2 + (d-1)^2 + (m-1)^2} \quad (7)$$

where:

-  $m = \frac{\bar{X}}{X^*}$ : the ratio between the mean of the simulated and observed data.

-  $r = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(X_i^* - \bar{X}^*)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i^* - \bar{X}^*)^2}}$ : the Pearson correlation coefficient.

-  $d = \frac{\bar{X} \sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}}{\bar{X}^* \sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i^* - \bar{X}^*)^2}}$ : the ratio between the standard deviation of simulated and observed values.

Moreover, the use of KGE allows the performance of adjoint-based and Sobol methods (Sobol, 1993) to be compared. The latter had recently been explored in (Henine et al., 2022).

### 2.3.2. Global adjoint sensitivity analysis (GASA)

While the local SA answers how a small perturbation around the background value  $U_b$  influences the model response  $X$ , the global SA focuses on the model output variance or, more precisely, on how the input variability influences the output variance. The global SA reveals which parts of the output variance are due to different inputs by estimating Sobol indices, which are a central tool (and key point) since they provide a quantitative and rigorous overview of the influence of inputs on the model response. The commonly used global SA method is the variance-based ANOVA decomposition. This paper introduces the adjoint-based global SA described in (Gejadze et al., 2019), featuring a methodology that derives a generalized relationship between the global sensitivity indices and the Polynomial Chaos coefficients.

The variability of inputs is represented by a sample of random vectors from a given probability distribution. For example, one can consider the Gaussian distribution using the background vector  $U_b$  as its mode. Since in our case the informative priors for  $U$  are either not available or not accurate enough, we use the uniform distribution to define a random sample within a defined interval  $[a_i, b_i]$  for each element of  $U$ , as follows:

$$\begin{aligned} \xi_i &\in u(a_i, b_i) \\ \xi_i &= (b_i - a_i) * \varepsilon_i + a_i, \varepsilon_i \in u(0, 1) \end{aligned} \quad (8)$$

The bounds  $a$  and  $b$  are specified for all SIDRA-RU parameters. The choice of the uniform distribution overcomes the need for background  $U_b$  and, subsequently, for the pre-calibration step.

The sample size is chosen by taking into account the computational requirements and model complexity into account. Since the SIDRA-RU is relatively inexpensive, it is feasible to use a relatively large sample size,

which can be chosen to compromise between the stability of the sensitivities and CPU time.

In this paper, we only consider the first-order ‘main-effect’  $S_i$  indices as well as the ‘total-effect’  $S_i^T$  indices (Saltelli, 2002), defined as follows:

$$\begin{cases} S_i = \frac{\text{Var}(E[J(\xi)|\xi_i])}{\text{Var}(J(\xi))} \\ S_i^T = \frac{\text{Var}(J(\xi)) - \text{Var}(E[J(\xi)|\xi_{-i}])}{\text{Var}(J(\xi))} \end{cases} \quad (9)$$

Where  $J(\xi)|_{\xi_i}$  represents the random value of  $J$ , with the input component  $\xi_i$  being fixed at its generic value;  $\xi_{-i}$  stands for ‘all, but  $i$ ’, and  $\text{Var}(J(\xi))$  is the total variance of  $J(\xi)$ .

While the main-effect indices, which are commonly used in ANOVA analysis, quantify the single influence of individual variables or some groups of variables, the total-effect indices measure the influence of a variable jointly with all its interactions with other variables. Alternatively, these indices can be viewed as a measure of the variability remaining to the output when all but one input variables are fixed. If the total sensitivity index of a variable is sufficiently small, this variable can be removed from further analysis, because neither the variable nor any of its order interactions have an impact on the valuable function. Thus, the total sensitivity index can be used to detect the essential variables for the calibration process.

The methodology presented in Gejadze et al. (2019) suggests a generalized approximation for the upper bound of the total-effect indices  $S_i^T$  based on a computation of the derivative of the valuable function  $J$ . We limit ourselves here to the first-order analysis. Future work will investigate the approximation of  $S_i^T$  in considering second-order interactions. Given that  $\xi$  is a vector constituted of independent and identically distributed normal random variables, the following estimate holds:

$$S_i^T \text{Var}(J(\xi)) \leq E \left[ \left( \frac{\partial J(\xi)}{\partial \xi_i} \right)^2 \right] \quad (10)$$

In the case of independent uniformly distributed variables defined over the interval  $[a_i, b_i]$  (Lamboni et al., 2013), the following can be written:

$$S_i^T \text{Var}(J(\xi)) \leq E \left[ \left( \frac{\partial J(\xi)}{\partial \xi_{in}} \right)^2 \right] \left( \frac{(b_i - a_i)}{\pi} \right)^2 \quad (11)$$

Similarly, we employ the same formulation of the valuable function introduced in Section 2.3.1. The gradient of  $J$  within the GASA framework is computed using automatic differentiation. A detailed algorithm of the GASA applied to the SIDRA-RU model is described in Fig. 5.

### 2.4. Variational data assimilation algorithm

Data assimilation methods are widely used in the geophysical sciences (Reichle, 2008). These methods provide the best possible estimates of unknown model inputs (initial and driving conditions, parameters) by combining all available information: observations, *a priori* data (coming from expertise or preprocessing), and knowledge of the physics of the underlying phenomena incorporated into the model.

In the ‘forward’ or ‘simulation’ mode, the forcing terms (rainfall and PET) and the SIDRA-RU model parameters are provided as known inputs in order to simulate the drainage discharge. The ‘backward’ or ‘inverse’ mode seeks to estimate the unknown input parameters by assimilating available information from the observed output discharge (Fig. 6).

The recent paper written by Jeantet et al. (2021) presents an example that uses the ‘Michel calibration (PAP-GR)’ algorithm to estimate the parameters ( $K_{\text{sat}}$ ,  $\mu$ ,  $\text{SSDI}$  and  $S_{\text{inter}}$ ). This algorithm was originally developed at INRAE (formerly IRSTEA) to calibrate the GR (*Génie Rural*) hydrological models (Perrin et al., 2003). An operational version of the algorithm (*airGR*) is available in an R package (Coron et al., 2017). This

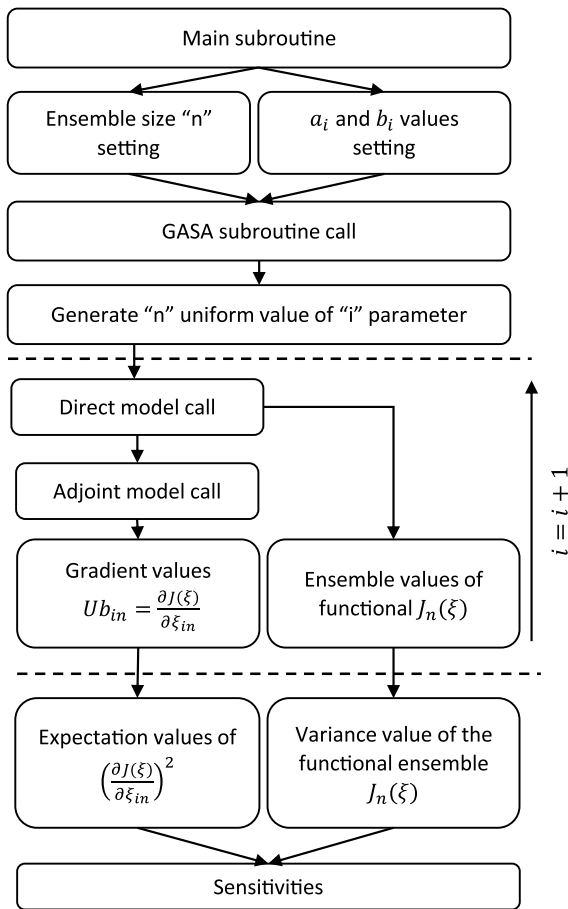


Fig. 5. Simplified version of the global adjoint SA algorithm.

method is initially based on assigning a probability distribution law for each calibrated parameter in order to target the optimal variation domain. The calibration procedure is then refined by searching for the optimal parameter values within the pre-selected bounds. The objective function used through the PAP-GR routine depends on the calibration target (e.g. low or high flow, volume improvement). For more detail, one can refer to the paper of (Jeantet et al., 2021).

The VDA yields optimal estimates of the unknown parameters by minimizing the cost function:

$$J(U) = \frac{1}{2} \| (R^{-1/2} M(U) - X^*) \|^2 + \frac{1}{2} \| B^{-1/2} (U - U_b) \|^2 \quad (12)$$

under the box constraints  $a \leq U \leq b$ . Here,  $B = E(\xi_b \xi_b^T)$  and  $R = E(\xi_o \xi_o^T)$  are the covariance matrices of the background and observation errors,  $\xi_b$  and  $\xi_o$ , respectively. As in Section 2.3.1, we consider  $B = \text{diag}(\sigma_i^2), i = 1, \dots, \bar{n}$ , where  $\sigma_i$  is the standard deviation, and  $\bar{n}$  is the dimension of the control subset. Note that a-priori information on the parameters is represented by the bounds  $a$  and  $b$ . Since (12) implies the Gaussian distribution of  $\xi_b$ , we define  $\sigma_i = ((b_i - a_i)/2)/3$ .

The observation error  $\xi_o$  includes directly the measurement error, plus projections into the observation space of other errors (forcing data errors, structural errors). Since  $R$  is difficult to evaluate, we assume it is diagonal, with uniform variance  $\alpha^2$ . Then (12) can be written in the form.

$$J(U, \alpha) = \frac{1}{2} \| (M(U) - X^*) \|^2 + \frac{\alpha^2}{2} \| B^{-1/2} (U - U_b) \|^2 \quad (12a)$$

Where  $\alpha$  has to be estimated alongside  $U$  from an auxiliary condition on  $U$ . This is a ‘relaxed’ formulation which roughly takes into account all uncertainties not included into the control vector. In practice, instead of solving this problem explicitly, one can consider the minimization problem for the cost function.

$$J(W) = \frac{1}{2} \| (M(U_b + B^{1/2} W) - X^*) \|^2 \quad (13)$$

Where  $W$  is defined via the change of variables  $U = U_b + B^{1/2} W$ ,

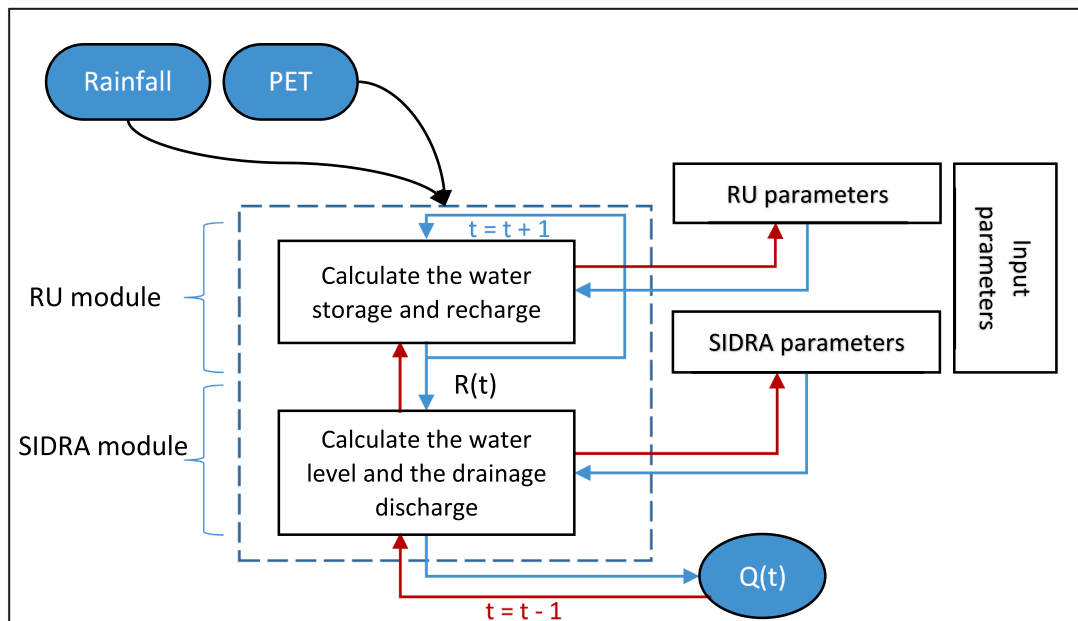


Fig. 6. Scheme describing the operating mode of the direct problem (blue arrows) and inverse problem (red arrows) methods for the case of the SIDRA-RU model. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

complemented with an appropriate iterations stopping criteria (L-curve). This is an iterative regularization implementation of (12a), as described in (Gejadze and Malaterre, 2017; Oubanas et al., 2018).

In the present study, a limited memory L-BFGS-B algorithm (Zhu et al., 1997) has been employed to perform the minimization step involving box-constrained set of parameters in order to avoid unphysical solutions. As explained above, the choice of the VDA method is largely motivated by the need to investigate and optimize the upgraded version of SIDRA-RU (to be reported in a future paper), which will be able to simulate the daily nitrate concentration values by integrating the unknown distributed variable, in addition to the model input parameters. The mentioned distributed variable represents the potentially leachable quantity of the nitrate initially trapped in the soil surface layer. This quantity is estimated once a year, generally at the end of the autumn season. The control vector will then be extended accordingly. For this reason, the choice of variational DA is justified since the algorithm sought needs to be robust to the present uncertainties and heterogeneity of the variables involved. Hence, this paper offers the first implementation of the VDA to SIDRA-type models, which will be adapted to the new upgraded version.

Let us note that (12) is the strong-constraint variational formulation, which is valid under the perfect model assumption. In the variational DA framework, the model error is usually treated via the weak-constraint formulation (Tremolet, 2006). This approach is proved useful in the classical DA in weather and ocean prediction systems, where the model state at the beginning of the prediction window is of major concern. In hydrology, the method has been used as a part of the hybrid-filtering algorithm in (Abbaszadeh et al., 2019). However, the usefulness of the weak formulation for solving the pure calibration problems is far less evident. Besides, being a conceptual and approximate model, SIDRA-RU is characterized by a structural uncertainty, which is not exactly the model error as it is understood in the classical applications (for example, due to random forcing). A more appropriate approach to deal with the structural uncertainty seems the model selection in the Expectation-Maximization framework (Beal, 2003). This is a topic for a possible future development, but we keep the strong-constraint DA formulation as a first step in this direction.

#### 2.4.1. Toward avoiding the local minima issues

Due to the ill-posedness of certain inverse problems, the corresponding minimization process may suffer from the presence of the local minima, which prevent it from reaching the global one. Various approaches have been investigated to mitigate this difficulty. Inspired by the works of Duan et al. (1992) and Skahill and Doherty (2006), we suggest using an ensemble minimization framework. The idea here is to start each individual minimization process from a different first guess, which might result in different minimization trajectories, thus limiting the dependence of the optimal solution from the prior knowledge and its uncertainty. The ensemble of priors/backgrounds (used as initial points for minimization) is generated using a uniform distribution and is limited to the sufficient subset elements, as identified through the GASA method (see Section 3.1). Two configurations have been tested herein: 1) the input parameters are perturbed one by one, setting the remaining ones at their optimal values; and 2) parameters are perturbed simultaneously. The ensemble size is then chosen to compromise target accuracy and available computational resources.

#### 2.4.2. Hybrid BV method: description

As mentioned above, if the estimation problem is ill-posed in terms of the uniqueness condition, looking for the global minimum might be useless in principle. That is, the resulting posterior distribution could be multi-modal, with modes having nearly the same probability values, but corresponding to noticeably different combinations of parameters. Since both the model and the observations are not 'perfect', choosing the posterior mode with the largest probability (or the 'global' minimum in terms of the cost-function) could be a wrong decision. Thus, the remedy

is to look for the posterior mean instead. This should result into more robust (reliable) parameter estimates. Since the direct use of the Bayesian methods could be computationally too expensive, we suggest a novel hybrid BV method combining variational and Bayesian elements, which can be considered as an upgrade to the method presented in (Skahill and Doherty, 2006).

Let us consider an ensemble of optimal solutions  $U_b$ ,  $i = 1, \dots, N$ , where each  $U_i$  is the result of minimization of the cost-function (13), involving a randomly chosen background  $U_b$  from the probability distribution  $\rho(U)$ . Let  $J_i = J(U_i)$  be the corresponding value of (13), and  $J_{min}$  the minimum value of  $J_i$  over the ensemble. Now we introduce the likelihood function in the form:

$$\mathcal{L}_i^k = \exp\left(-2^k(J_i/J_{min} - 1)^2\right) \quad (14)$$

where  $k$  is the parameter, which controls the decay rate of the likelihood function. This parameter is similar to the regularization parameter used in the classical Tikhonov approach. Then, the posterior ensemble mean and variance are computed as follows:

$$\bar{U}^k = \frac{1}{C_1} \sum_{i=1}^N U_i \mathcal{L}_i^k \rho(U_i) \quad (15)$$

$$\text{Var}(U)^k = \frac{1}{C_1} \sum_{i=1}^N (U_i - \bar{U}^k) \circ (U_i - \bar{U}^k) \mathcal{L}_i^k \rho(U_i) \quad (16)$$

$$C_1 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{L}_i^k \rho(U_i)$$

The L-curve approach is adapted here for choosing  $k$ . L-curve is defined as a parametric curve  $\{J(\bar{U}^k), D^k\}$ ,  $k = -20, \dots, 20$ , where

$$D^k = (\bar{U}^k - \bar{U}^{-\infty})^T \left(\text{Var}(U)^k\right)^{-1} \circ (\bar{U}^k - \bar{U}^{-\infty}) \quad (17)$$

is the probabilistic (Mahalanobis) distance between  $\bar{U}^k$  and

$$\bar{U}^{-\infty} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N U_n \quad (18)$$

The idea of the 'L-curve' method is to choose the value of  $k$  located near the corner, so that both the cost-function  $J(\bar{U}^k)$  and the distance  $D^k$  are simultaneously minimized. One particular example of the L-curve encountered during computations is presented in Fig. 13. Note that the uniform prior distribution for  $U_b$  is assumed in this paper, therefore the posterior moments are fully defined by the likelihood function (14).

#### 2.5. Evaluation of the temporal robustness of the model

An ensemble of operational tests proposed by Klemeš (1986) has been widely used to evaluate the spatiotemporal robustness of hydrological models (Henriksen et al., 2003; Guo et al., 2020; Jeantet et al., 2021). In the following, we have selected the split sample test to evaluate the temporal robustness of the SIDRA-RU model. This method divides the study period into two subperiods (e.g.  $P_1$  and  $P_2$ ). The first window  $P_1$  is considered as an assimilation period. Hence, the daily discharge is assimilated using VDA in order to estimate the control vector  $U$ . The parameter estimates obtained are then validated by comparing the corresponding model predictions with observations over the period  $P_2$ . Next, the assimilation and validation periods  $P_1$  and  $P_2$  are swapped to validate the estimator's temporal robustness.

Overall, four metrics have been selected to evaluate the model's predictive performance. One can recall the cost function (Section 2.4; Eq. (13)) and the KGE metric (Section 2.3.1; Eq. (7)), relevant to assess the variability of the drainage discharge. In addition, we use the root mean square error (RMSE (Kenney, 1939); Eq. (19)), which informs of the residuals spread and the Nash-Sutcliffe Efficiency (NSE (Nash and Sutcliffe, 1970)), as defined in Eq. (20), which is introduced to assess the performance of several hydrological and water quality models.

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (X_i^* - X_i)^2}{N}} \quad (19)$$

$$NSE = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (X_i^* - X_i)^2}{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2} \quad (20)$$

In addition, we are quantifying the water balance conservation by calculating the discrepancy on cumulative drained water volumes.

### 3. Results

#### 3.1. Adjoint local and global sensitivity analyses

The LASA method was first applied to assess the influence of SIDRA-RU input parameters on the KGE metric. First, the local sensitivity around 'pre-calibrated prior' (Table 2) was computed (as illustrated in Fig. 7 with red crosses) using the entire data (Fig. 3). Results show that the highest sensitivities are to soil parameters  $\mu$  and  $K_{sat}$  and reservoir parameter  $S_{inter}$ .

Second, in order to investigate the impact of the prior on the resulting sensitivities, a set of 1000 random input values has been generated using the uniform distribution defined over the interval [a,b] (Eq. (8) and Table 2). The corresponding sensitivities have been then computed using LASA. The boxplots in Fig. 7 show the range of impact of each parameter. The highest range is observed for parameters  $K_{sat}$ ,  $\mu$  and further  $S_{inter}$ .  $A$  and  $\beta$  whereas the smallest range was identified for parameters  $S$ ,  $P$  and  $\alpha$ .

Further analysis has therefore been performed using the GASA method over the entire range of parameter variation, as defined within bounds [a,b]. A random ensemble of SIDRA-RU input parameters has been generated from the uniform distribution. The ensemble size was chosen to balance the stability of results and low CPU time. Hence, testing different ensemble sizes (ranging from 100 to 10000) allowed the selection of  $n = 2000$ , ensuring stable sensitivity results. One can note that only  $\sim 2.6$  s was needed to complete the 2000 simulations.

Table 2 lists the values of the boundaries (a) and (b) assigned according to both the prior knowledge of SIDRA-RU model parameters and the data collected from the Chantemerle field. Accordingly,  $K_{sat}$ ,  $\mu$ ,  $S_{inter}$ , and  $SSDI$  parameter bounds have been selected from (Henine et al., 2022). The other parameter boundaries was assigned so as to avoid outliers.

The obtained 'total-effect' sensitivities using the GASA approach are shown in Fig. 8. The results indicate that the saturated hydraulic conductivity  $K_{sat}$  is the most influential input parameter, followed by the drainage porosity  $\mu$  and then the intermediate water level threshold in the conceptual reservoir  $S_{inter}$ , followed by the other parameters. This finding means that only  $K_{sat}$ ,  $\mu$  and subsequent  $S_{inter}$  parameters exert the strongest impact on KGE values. Although  $SSDI$  is classified as a low-impact parameter, it is included in the control vector due to its strong link with  $S_{inter}$  parameter (Section 2.2).

#### 3.2. SIDRA-RU parameters estimation using the VDA method

Based on the results of GASA (Section 3.1), the VDA method was implemented to estimate the impacting part of the input vector on the model output (i.e.  $U = \{K_{sat}, \mu, S_{inter}, SSDI\}$ ). Two experimental set-ups

**Table 2**

Minimum (a) and maximum (b) values defined for each parameter.

Input	S (ha)	l (m)	$K_{sat}$ (m/day)	$\mu$ (-)	A (-)	C (-)	P (m)	SSDI (mm)	$S_{inter}$ (mm)	$\alpha$ (-)	$\beta$ (-)
a	35.40	3.50	0.02	0.010	0.80	0.85	0.60	10.00	55.00	0.00	0.50
b	37.40	6.00	1.00	0.130	0.90	0.95	1.20	55.00	225.00	1.00	1.00
Pre-calibrated Prior	36.40	5.00	0.27	0.042	0.86	0.89	0.90	46.48	92.58	0.33	0.90

have been considered:

- the split sample test, considering the two-time windows  $P_1$ , covering the period from 2008 to 2010, and  $P_2$  covering the period 2010–2013, to assess the model's predictive performance;
- the full sample test (over the entire observation period,  $P_1 \cup P_2$ ), with the resulting simulated discharge to be compared to the one obtained with parameters estimated using the PAP-GR calibration method.

#### 3.2.1. Validation of the variational DA framework

Table 3 shows the results of the split sample test. Good performance in terms of KGE, NSE and RMSE is achieved for both the assimilation and validation periods ( $KGE > 0.66$ ;  $NSE > 0.53$ ; RMSE less than 2.44 l/s). Moreover, swapping the assimilation and validation periods  $P_1$  and  $P_2$  leads to relatively comparable estimates (e.g.  $S_{inter}$  estimated at 71.2 mm and 85.8 mm over periods  $P_1$  and  $P_2$ , respectively), and similar performance metric values. One can also notice that distances between the SIDRA parameters (e.g.  $\mu$  on  $P_1$  vs  $\mu$  on  $P_2$ ) are smaller compared to those for the conceptual parameters (e.g.  $S_{inter}$  on  $P_1$  vs  $S_{inter}$  on  $P_2$ ).

#### 3.2.2. VDA vs. Gradient-free PAP-GR method

Below, the VDA method is compared to the gradient-free PAP-GR calibration method by estimating the control vector values over the entire observation period (2008–2013). Three experimental configurations are considered with the following sets of input parameters:

- Non-informative (open-loop) inputs (priors/backgrounds)
- Calibrated inputs from Michel's calibration algorithm (PAP-GR)
- Estimated inputs from the VDA method, taking the background values from (a)

Table 4 shows the input parameters obtained for configurations (a), (b) and (c), along with the corresponding performance metrics values. Note that the improvement achieved by VDA compared to the PAP-GR calibration algorithm is indicated in brackets.

In the experimental set-up (c), the VDA is used starting from a non-informative background from (a) in order to estimate input parameters  $K_{sat}$ ,  $\mu$ ,  $S_{inter}$  and  $SSDI$  simultaneously. Since the bounds of the physical parameters range have not been integrated into SIDRA-RU, a constrained cost minimization is performed using the L-BFGS-B method to eliminate all non-physical solutions. Table 5 summarizes the lower and upper bounds assigned to each parameter. The choice of  $K_{sat}$  and  $\mu$  bounds is based on field measurements carried out in 70 referenced soils in France (Lagacherie, 1987).  $SSDI$  and  $S_{inter}$  bounds are presented in (Henine et al., 2022). The estimated control vector (c) is comparable to that derived from the split sample test in the first experiment (Table 3).

Fig. 9 illustrates the observed and simulated discharges, over the total target period, according to the three experimental configurations (a, b, c). In addition, the respective cumulative water volume has been plotted in (d), thus making it possible to compare the performance obtained using the variational calibration method and that resulting from the application of the PAP-GR calibration algorithm.

The model performance after VDA is slightly better in terms of KGE, NSE and RMSE values, as compared to the PAP-GR calibration routine. Excluding the first year of data, generally used as a warming period to adjust the saturation degree in the conceptual reservoir, the discharge

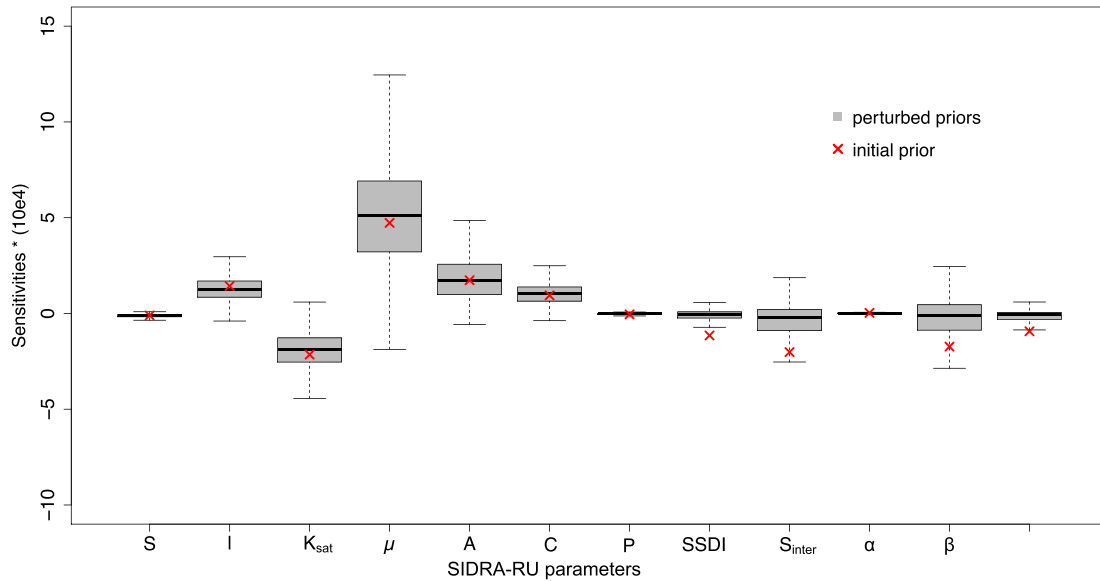


Fig. 7. Sensitivities of the “KGE metric” using a single ‘pre-calibrated prior’, in red crosses; using ensemble of priors, in boxplots. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

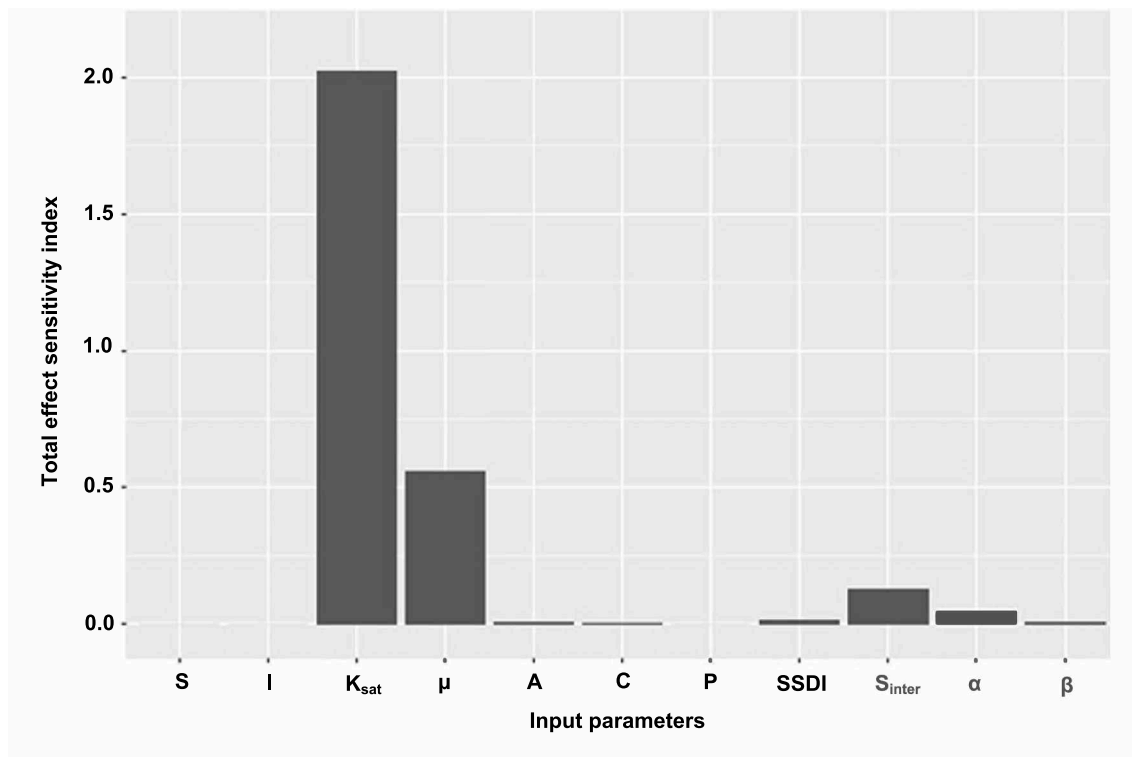


Fig. 8. The influence of input parameters on the valuable function J (KGE).

values are well represented in both cases (Fig. 9b and 9c). In addition, the analysis of the simulated cumulative drained water over the total target period (five drainage seasons) in comparison with the measured discharge, indicates only a 1% ratio between measured and simulated total drained water volume using VDA ( $\Delta V = 4.8$  mm over five years of data; Fig. 9d) versus 10% when using the PAP-GR calibration algorithm ( $\Delta V = 58.7$  mm).

### 3.3. Investigating the local minima issue

The second part of this study focuses on the issue of local minima. Two experimental set-ups have been considered. First, we analyze the convergence process for a given single parameter, assuming that the remaining parameters are known and set to their optimal values. Second, we investigate the convergence process when all parameters are updated simultaneously.



**Table 3**  
Split sample test results based on assimilation of the drainage discharge data.

	RMSE (l/s)	NSE (-)	KGE (-)	Cost (-)	RMSE (l/s)	NSE (-)	KGE (-)	Cost (-)	$K_{sat}$ (m/d)	$\mu$ (-)	SSDI (mm)	$S_{inter}$ (mm)
P1 → P2	Estimation period P1 (2008-2010)				Validation period P2 (2010-2013)				Estimated parameters			
	1.62	0.56	0.66	0.74	2.44	0.71	0.77	2.50	0.19	0.042	40.8	71.2
P2 → P1	Validation period P1 (2008-2010)				Estimation period P2 (2010-2013)				Estimated parameters			
	1.66	0.53	0.70	0.78	2.41	0.72	0.77	2.45	0.23	0.042	35.2	85.8

**Table 4**  
Performance criteria resulting from: (a) the use of open-loop parameters; the parameter estimation using both (b) the PAP-GR and (c) the VDA minimization methods.

	Control vector values				Performance criteria		
	$K_{sat}$ (m/day)	$\mu$ (-)	SSDI (mm)	$S_{inter}$ (mm)	RMSE (l/s)	NSE (-)	KGE (-)
a	0.9	0.06	18.0	30.0	4.66	-0.46	0.08
b	0.272	0.043	46.48	92.58	2.13	0.70	0.76
c	0.228	0.044	41.93	84.84	2.07	0.71	0.78
					(-0.06)	(+0.01)	(+0.02)

**Table 5**  
Assigned lower and upper bound values of each calibrated input parameter.

Parameter	$K_{sat}$ (m/day)	$\mu$ (-)	SSDI (mm)	$S_{inter}$ (mm)
Lower bound	0.03	0.02	10.0	55.0
Upper bound	1.5	0.07	60.0	225.0

**3.3.1. Single parameter estimation**

In this experiment, each parameter  $U_i$  is estimated separately while assuming that all other inputs are known and set to their optimal values (Table 4, Row C). Hence, the control vector includes one parameter at a time. For each parameter  $U_i$ , an ensemble of priors/backgrounds of size  $n = 100$  is generated and an ensemble estimation using the VDA is performed. Fig. 10 illustrates the convergence process for each parameter, starting from different initial values within the given ensemble. The red color represents successful minimization cases, where a cost function minimization has been reached. The corresponding ratios are presented in the legend, together with the unsuccessful cases shown in gray. Note that minimum cost values are generally reached after only 10 iterations.

It can be noticed that the ensembles of parameters  $K_{sat}$  and  $\mu$  converge towards unique values of 0.22 m.d<sup>-1</sup> and 0.047, respectively, regardless of the initial background value. However, SSDI and  $S_{inter}$  parameters converge towards different optimal values. Those corresponding to the minimum cost function are 42 mm and 82 mm, respectively, which are still consistent with the result obtained in Section 3.2.

**3.3.2. Simultaneous minimization**

Similar to the first set-up, in this second experiment, an ensemble of size  $n = 100$  of prior/background vectors is generated. The simultaneous minimization of all parameters was then performed using the VDA method. Fig. 11 shows the parameter sets that converge toward minimum cost function values, presented here in red. Four main clusters (red dots) have been identified. Similar cluster positions for the two physically based parameters  $K_{sat}$  [0.19–0.25] m.d<sup>-1</sup> and  $\mu$  [0.040–0.047] can be detected. Interestingly, the conceptual-based parameters SSDI [47–61] mm and  $S_{inter}$  [65–81] mm display opposite cluster positions.

Similar to the first experiment, Fig. 12 shows the minimization trajectories. The red color refers to the successful convergence cases reaching the minimum cost function value. It can be observed that several solutions are possible when estimating all parameters and no global minimum can be clearly identified. Dashed lines correspond to

the optimal solution of each parameter in terms of the minimized cost function. The best control vector estimates corresponds to:  $K_{sat} = 0.22$  m/day,  $\mu = 0.044$  (-), SSDI = 48.68 mm, and  $S_{inter} = 78.76$  mm.

**3.4. Hybrid BV approach to improve the solution stability**

The model parameters are estimated by the hybrid BV method following the ‘split sample test’ methodology (see Section 2.5).

The parameter estimations presented in Table 3 (for P1 and P2), and Table 4 (for P) have been embedded in Table 6 to allow a better comparison between hybrid DA and variational DA methods. First, one can notice that the difference between the estimates  $K_{sat}$  and  $S_{inter}$  obtained using the hybrid DA on different periods P1 and P2 is less, whereas for  $\mu$  and SSDI is slightly larger. One key model characteristic which defines the water table dynamics is given by  $S_{max} = SSDI + S_{inter}$ . The difference  $S_{max|P2} - S_{max|P1}$  by the hybrid BV method makes 5.29 mm, against 9.1 mm by the variational DA. This indicates that the results by the hybrid BV method, as expected, are generally more robust. Secondly, while the estimates  $K_{sat|P}$  and  $\mu|P$  are nearly the same for both methods, they are slightly different for  $SSDI|P$  and  $S_{inter|P}$ .

As an example, Fig. 13 shows the L-curve obtained by processing the ensemble of optimal solutions corresponding to P2 period. Here, one can see a distinctive corner at  $k = 13$ . This position ensures the robustness of the solution by selecting low values of  $D(k)$  and  $J(k)$ .

**4. Discussion**

The paper’s content revolves around improving the new agricultural drainage model. First, the adjoint sensitivity analysis (local and global) has been conducted to identify the most impacting parameters of the SIDRA-RU model. Then, VDA and hybrid BV frameworks have been validated over five years of daily-observed discharge data and used afterwards to estimate the best combination of SIDRA-RU parameters.

**4.1. Adjoint SA**

The local adjoint SA result suggests that  $\mu$  and  $K_{sat}$  are the most influential parameters. However, one can notice that the choice of prior could change the parameter ranking which emphasizes the importance of the global analysis. In fact, no priors are required to apply the global adjoint approach. The global SA method indicates that  $K_{sat}$  and  $\mu$  have the most impact on the model output. These two parameters govern the physically based part of the model and describe the dynamics and reactivity of the perched water table and discharges. The conceptual parameter  $S_{inter}$ , ranked third, controls the beginning of the intensive drainage season, which generally occurs during winter, while  $\beta$  is dependent on the type of vegetation cover. Since information on crop rotation is not always available, parameter  $\beta$  is set by default equal to 1. Future work will investigate the possibilities of integrating a crop rotation module should data be available.

The results obtained are consistent with the analysis performed using Sobol’s total and main-order sensitivity indices in (Henine et al., 2022). This output confirms that  $K_{sat}$  and  $\mu$  have the highest impact on KGE, whereas SSDI and  $S_{inter}$  parameters practically determine the starting date of the drainage season. These four parameters constitute the sufficient control subset of parameters, or the ‘control vector’. It should be

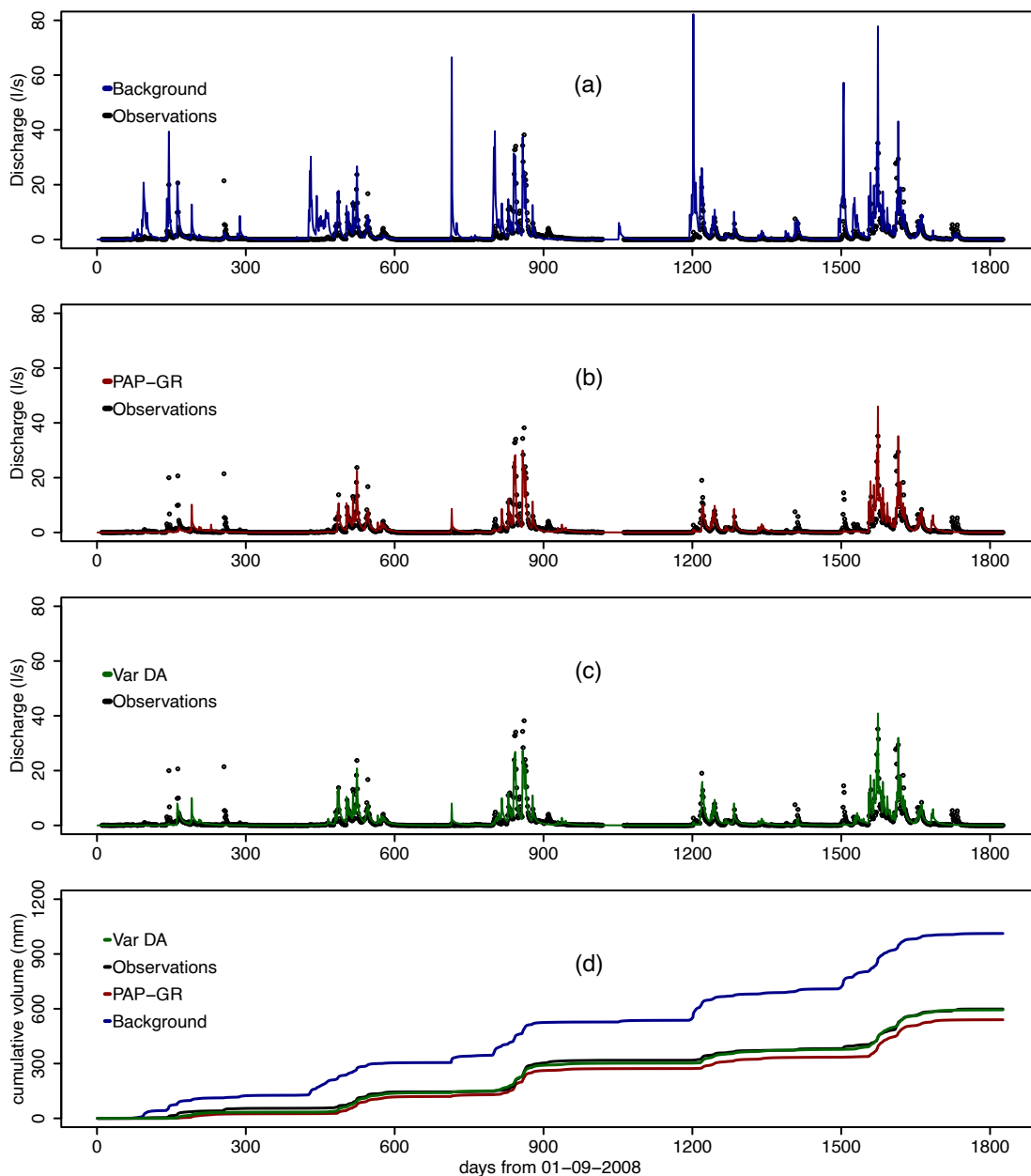


Fig. 9. Graphical comparison between experimental configurations (a), (b) and (c); (d) shows the corresponding cumulative drainage discharge.

noted that one limitation of the Sobol method is the significant computing resources required (Iooss and Lemaître, 2015; Zhang et al., 2015). This constraint accounts for the main reason why the analysis was conducted on a limited input vector in (Henine et al., 2022) paper. Such a limitation has been overcome by using the adjoint-based sensitivity analysis approach, which allows considering all SIDRA-RU inputs in a single model run. In addition, the limited number of SIDRA-RU input parameters avoids the need to use sophisticated sampling methods, e.g. Latin hypercube (Viana, 2016), which are typically reserved for models with higher number of inputs (Manache and Melching, 2004).

#### 4.2. Model parameters improvement

The split sample test validates the accurate implementation of the VDA method. Moreover, we compare the estimated values of SIDRA-RU parameters with those found in the literature. Therefore, it has been possible to verify the estimated parameters against more than 100 re-

ported values of  $K_{sat}$  and  $\mu$ , corresponding to the silty soil (consistent with the Chantemerle soil texture). The latter have been extracted by Jeantet et al. (2021) from the drainage reference sector reports (Lagacherie, 1987). The probability density functions (PDF) of the saturated hydraulic conductivity ( $K_{sat}$ ) and drainage porosity ( $\mu$ ) have been calculated using their lognormal distributions, with the most frequently observed values (modes) corresponding to  $0.235 \text{ m.day}^{-1}$ ,  $0.017$  for  $K_{sat}$  and  $\mu$ , respectively. The same soil texture could be found at the Arrois agricultural catchment (located 50 km south of Chartres, France), where the measured value of  $K_{sat}$  at subsoil depth equals  $0.41 \text{ m.day}^{-1}$  (Zimmer et al., 1995). Therefore, the published data values of  $K_{sat}$  and  $\mu$  are close and consistent with the estimated values obtained by the VDA method.

Furthermore, Jamagne et al. (1977) and Goulet et al. (2004) sought to determine the water holding capacity (WHC) function of certain soil parameters (e.g. water content at field capacity and wilting point, apparent density). In these studies, the WHC ranged between  $1 \text{ mm.cm}^{-1}$  and  $1.75 \text{ mm.cm}^{-1}$  for silty soil. Based on the drain depth of the

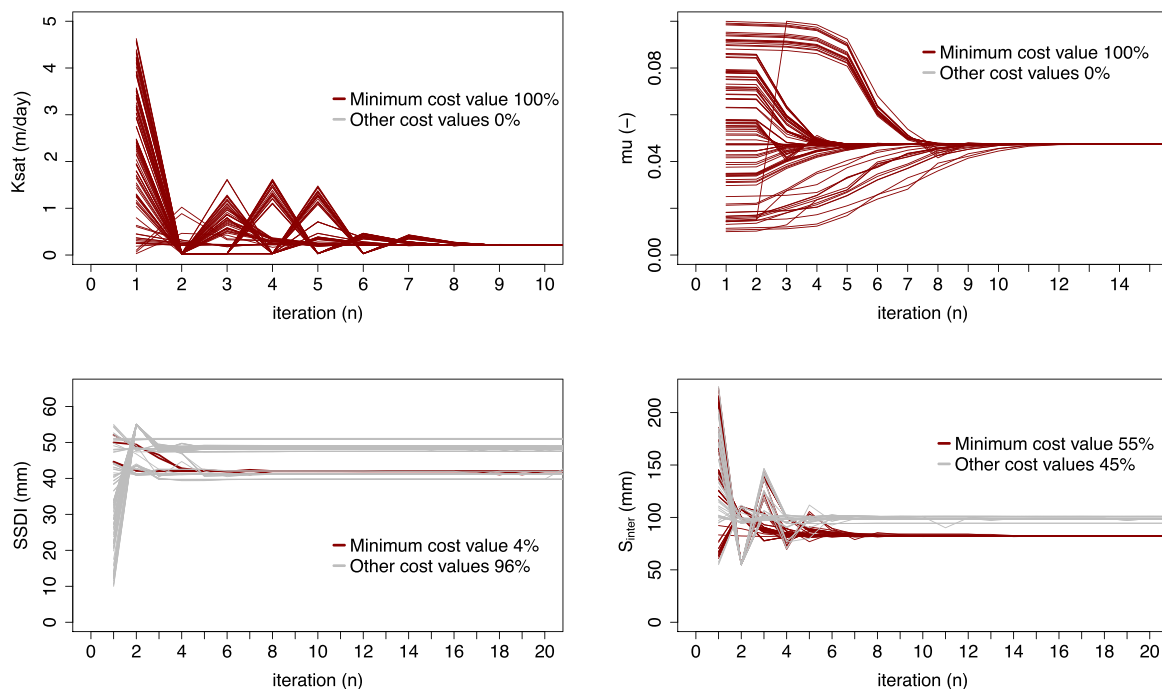


Fig. 10. Convergence trajectories of parameters from prior/background values towards the optimal values during the single parameter estimation process.

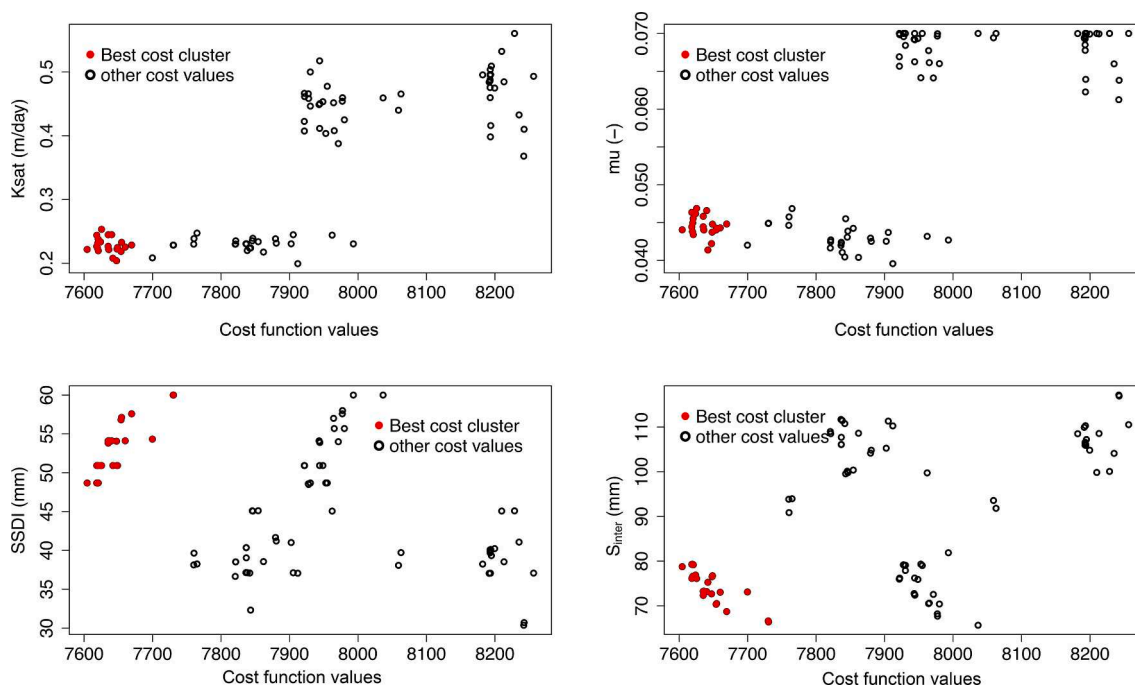


Fig. 11. Final cost values according to their corresponding parameter values.

Chantemerle field (90 cm), these values correspond to 90 mm and 157.5 mm, respectively. The estimates using VDA are therefore consistent with these values and lie within the WHC variation interval. The estimated SIDRA-RU parameters are listed in Table 7 alongside the field-scale observed data.

One can see that VDA performs slightly better in terms of metrics evaluation (e.g. NSE, KGE) than the PAP-GR calibration. These results indicate that VDA could be seen as a relevant methodology to improve

the predictive performance of the SIDRA-RU model. While the adjoint model of SIDRA-RU has been successfully obtained through the automatic differentiation (AD) tool TAPENADE, other large-scale models may need substantial programming effort and forward model adaptation to get the adjoint code. As an alternative, some methods, including the reduced adjoint approach, have been proposed to avoid laborious adjoint implementations (Antoulas, 2005; Altaf et al., 2013) but they require many function evaluations and converge towards approximate

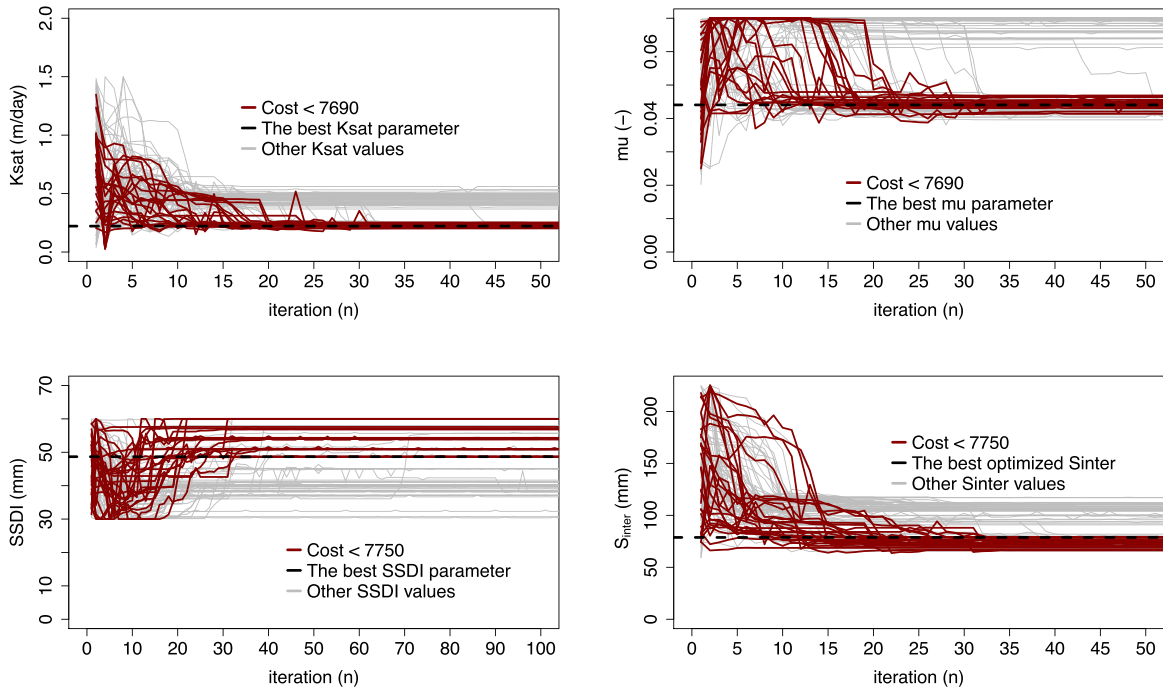


Fig. 12. Convergence trajectories from prior/background values towards optimal values (case of simultaneous minimization).

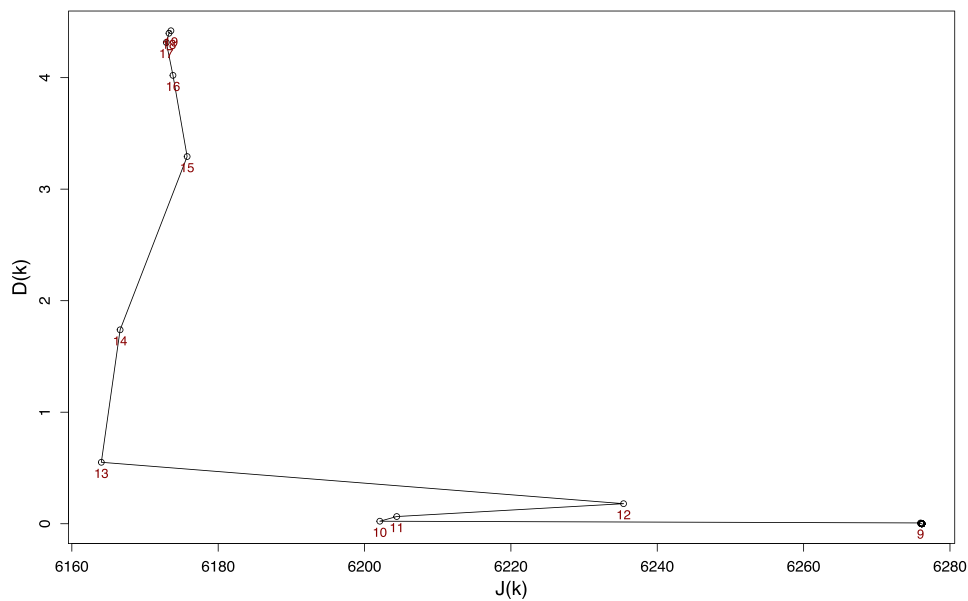


Fig. 13. L-curve, Chantemerle P2 2010–13, “k” are plotted in dark-red color. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

solutions (LeGresley and Alonso, 2000). Overall, the task of generating the adjoint of any upgraded version of the conceptual SIDRA-RU model looks straightforward, given that certain coding rules are being respected.

#### 4.3. Water balance simulation

A recent drainage modeling study, which aims to demonstrate the benefit of using a multi-objective minimization approach to improve the estimation of HYDRUS parameters, has shown a significant deviation (25%) between the cumulative measured and simulated water volumes, which corresponds to 50 mm in just one drainage season (Turunen et al.,

**Table 6**

Robust SIDRA-RU parameter estimations obtained by applying both, Hybrid BV and VDA methods.

Method	Parameter	$K_{sat}$ (mm. day <sup>-1</sup> )	$\mu$ (-)	SSDI (mm)	$S_{inter}$ (mm)	$S_{max}$ (mm)	k
Hybrid BV	Period P1 (2008–2010)	0.252	0.049	40.74	71.52	112.26	10
	Period P2 (2010–2013)	0.225	0.043	34.01	83.54	117.55	13
	Full period (2008–2013)	0.227	0.045	50.86	76.67	127.53	15
VDA	Period P1 (2008–2010)	0.190	0.042	40.80	71.20	112.00	–
	Period P2 (2010–2013)	0.230	0.042	35.20	85.80	121.00	–
	Full period (2008–2013)	0.228	0.044	41.93	84.84	126.77	–

**Table 7**

Estimated SIDRA-RU parameters using VDA compared with those found in the literature.

Source	$K_{sat}$ (m. day <sup>-1</sup> )	$\mu$ (-)	$S_{max}$ (mm)
Variational calibration (Lagacherie, 1987)	0.19; 0.23	0.044	112; 121
(Bouarfa, 1995)	0.235	0.017	–
(Zimmer et al., 1995)	0.4	0.026	–
(Jamagne et al. (1977) & Goulet et al. (2004))	–	–	[90, 157]

2020). In this paper, a relevant result confirms the strong ability of VDA to simulate accurately the volume of water exported from drained agricultural fields. In fact, less than 1% ratio between measured and simulated total drained water volume is obtained using VDA ( $\Delta V = 4.8$  mm over five years of data, less than 1 mm/year). The robustness of the VDA method implemented with the SIDRA-RU model has been successfully validated in Section 3.2.1 using the split sample test. It allows for a robust estimation of model parameters consistent with the *in-situ* values found in the literature. Moreover, the estimation of SIDRA-RU parameters using VDA instead of the PAP-GR calibration approach improves the daily discharge simulations and the cumulative water volume predictions, in particular. Finally, it would be worthwhile to investigate the impact of the sampling interval on the water volume prediction by considering weekly or bi-weekly discharge observations instead of daily ones (Oubanas et al., 2018).

#### 4.4. Local minima issues

Local minima issues is commonly encountered when solving ill-posed problems in variational formulations involving a gradient-based minimization. The application of sophisticated global optimization methods (e.g. Monte Carlo) could be useful to deal with strongly nonlinear systems (Hoteit, 2008). Here, we investigate a preliminary ensemble minimization framework, aiming to reach a stable global minima solution.

Consequently, the convergence of  $K_{sat}$  and  $\mu$  parameters towards a global minimum during the single optimization experiment highlights the strong consistency of the physically based SIDRA-RU module. However, the convergence pattern for parameters  $SSDI$  and  $S_{inter}$  differs: dependent on the priors, the minimization process converges to different cost function values, which underscores the presence of local minima or equifinality issues. In fact, these two parameters manage the conceptual part of the SIDRA-RU model; their contribution is limited to a short period, essentially during the first few days of each drainage season. Our results suggest that their values may require a dynamic year update during the minimization process. Additional information on the

reservoir capacity or the beginning of the drainage season may be needed to constrain further the minimization protocol concerning these reservoir parameters.

It is worth noting that the convergence speed may depend on the modeling approach (e.g. conceptual or physical, distributed or not), the choice of the optimization algorithm, and the parameter type. In fact, SIDRA module parameters (e.g.  $K_{sat}$ ,  $\mu$ ) find a stable solution following 20 iterations while conceptual ones (e.g.  $SSDI$ ,  $S_{inter}$ ) generally need 30 iterations. This explains the notable difference observed between the cost function thresholds.

Chossat and Saugnac (1985) highlight a potential relationship between  $K_{sat}$  and  $\mu$  for different soil textures. Our finding suggests that these two groups of parameters are complementary and may compensate each other, which typically leads to the occurrence of local minima and equifinality issues (nearly the same prediction obtained with different parameter values). The equifinality issue can be mitigated when assimilating additional information by the VDA, e.g. water level variations  $h(t)$ . We suggest herein that complementary information (namely nitrate concentrations  $[NO_3^-]$  and fluxes) will additionally constrain the solution in the upgraded SIDRA-RU version. The featured methods have been implemented in order to improve both the understanding and estimation of the SIDRA-RU input parameters. The present work can be extended to other drainage models.

#### 4.5. The potential of the hybrid BV approach

The implementation of the hybrid BV framework improves the stability of the obtained solution compared to the classical VDA. That is, the estimated parameters are more consistent from one study period to the other, which demonstrates the robustness of the proposed method. In fact, the estimated parameter values on P1 and P2 are similar (Table 6), in particular for the parameters  $K_{sat}$  and  $S_{max}$  (the reported difference between P1 and P2 estimated values are 0.027 mm.day<sup>-1</sup> and 5.3 mm, respectively). Moreover, the approach offers an automatic tool to select, cleverly and objectively, the most suitable and robust set of parameters, which was not the case by using visual interpretations (section 3.3). It is worthwhile in this context to discuss the results of the latest SIDRA-RU developments (Jeantet et al., 2021; Henine et al., 2022), which highlight the performance of the model in terms of discharge simulations and the robustness of the estimated parameters. It was observed that conceptual based parameters (e.g.  $S_{max} = SSDI + S_{inter}$ ) show a large deviation range [50 mm, 150 mm]. These estimated values remain scattered, regardless of their consistency as compared to the literature-based values (c.f. Table 7, last row). Otherwise, the limited number of information available in the literature makes complex any confrontation between the estimated conceptual parameters of the model and the field measurement values. Moreover, the structure of the conceptual block of the model may need some additional information to be able to manage the related parameters in a robust way and with a reduced level of uncertainty (e.g. hourly discharge observations, time-variant estimation of the conceptual parameters). In addition, let us note that any reliable conclusions on the relative performance of the two methods (hybrid BV against variational DA) cannot be made on a single test example, even within the identical twin experiment framework, where the 'true' values of parameters are known. This is significantly more difficult when considering realistic data and an approximate model (which is often the case with conceptual models).

## 5. Conclusions

Our first objective has been to evaluate the impact of the SIDRA-RU input parameters on the model output, to rank them and form a sufficient control set. This has been achieved using both local and global adjoint sensitivity analysis. Then, the parameters from the control set have been estimated by assimilating the drainage discharge data, collected from the 36-ha Chantemerle agricultural field for the period

2008–2013, using VDA.

In addition to the local adjoint SA, the global adjoint SA method has been investigated in application to the SIDRA-RU model. Based on estimating the upper bound of the “total-effect” Sobol indices, the GASA method has shown results consistent with the classical Sobol method (applied to the same model). In particular, the results of this analysis demonstrate that the two most influential parameters are  $K_{sat}$  and  $\mu$ . The GASA method has proven to be capable of estimating the impact of all input parameters at a very low computational time ( $\approx 2.6$  s). As a result, only 4 (out of 11) parameters have been selected for the calibration step.

The VDA method has been successfully implemented on the conceptual-analytical model SIDRA-RU. This method has been validated using the ‘split sample test’ and compared to Michel’s step-by-step calibration method (PAP-GR). Slightly better performance could be noted with the VDA method, which allowed estimating the best parameter set and reproducing a satisfactory daily drainage discharge simulation (KGE = 0.76 for PAP-GR vs. 0.78 for VDA). An important advantage of these estimates has been revealed by comparing the total cumulative drainage volumes. The parameters estimated using the VDA method yielded a cumulative volume close to the observed volume at the field outlet (not exceeding 4.8 mm and less than 1% discrepancy) compared to values obtained with PAP-GR (58.7 mm, for a 10% error). Moreover, the corresponding parameter values are consistent with those found in the literature under similar soil conditions (i.e. texture, climate). A planned forthcoming work will be to assimilate the nitrate concentration observations using the upgraded version of SIDRA-RU, which will integrate a newly developed nitrate transport model. We expect that the advantages of the implemented approach will be particularly beneficial for the coupled drainage/nitrate model, since it requires yearly estimations of a given input variable.

Lastly, the local minima issue has been explored. Our results here are in line with findings reported in the literature. It has been confirmed that using gradient-based minimization may lead to multiple possible solutions due to local minima. Therefore, a novel hybrid BV method has been implemented. Starting from an ensemble of optimal solutions given by

VDA, the posterior PDF is computed using a specially defined likelihood function. At least, in theory, the hybrid BV method has to provide a more robust estimate of the parameters (in average sense, i.e. over a representative set of the test cases). The fact that significantly different estimates for  $SSDI$  and  $S_{inter}$  have been obtained in the split sample test underlines the importance for further investigation in this direction.

#### CRediT authorship contribution statement

**Samy Chelil:** Methodology, Software, Writing – original draft. **Hind Oubanas:** Conceptualization, Methodology, Writing – review & editing. **Hocine Henine:** Methodology, Writing – review & editing. **Igor Gejadze:** Methodology, Writing – review & editing. **Pierre Olivier Malaterre:** Writing – review & editing. **Julien Tournebize:** Conceptualization, Writing – review & editing.

#### Declaration of Competing Interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

#### Data Availability.

Data archiving is underway. An upload within OZCAR network is scheduled (ORACLE <https://gisoracle.inrae.fr/>).

#### Acknowledgments

This research was supported by a PhD Grant from INRAE AQUA department. The authors would like to thank Irina Ginzburg for giving precious comments to improve this paper. We also thank farmers of the Chantemerle parcels and GIS ORACLE project for providing hydrological and climatic data.

## Appendix A

### A.1. Calculation of the corrected evapotranspiration (CET)

$$\text{Case 1 : If } (S(t) > 0.6 * S_{inter}) \quad \text{CET} = \beta * \text{PET}$$

$$\text{Case 2 : If } (S(t) < 0.6 * S_{inter}) \quad \text{CET} = \beta * \text{PET} * \exp\left(-\frac{0.6 * S_{inter} - S(t)}{S(t)}\right) \quad (\text{A.1})$$

$$\text{Case 3 : If } (S(t) < 0) \quad \text{CET} = 0$$

### A.2. Recharge (R) and water level in the soil reservoir (S) calculation

$$\begin{aligned} \text{Case 1 : If } (0 < S(t) < S_{inter}) \quad & S(t) = S(t-1) + (P - \text{CET}) \quad R(t) = 0 \\ \text{Case 2 : If } (S_{inter} < S(t) < S_{max}) \quad & S(t) = S(t-1) + (1 - \alpha) * (P - \text{CET}) \quad R(t) = \alpha * (P - \text{CET}) \\ \text{Case 3 : If } (S(t) > S_{max}) \quad & S(t) = S_{max} \quad R(t) = \alpha * (P - \text{CET}) \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

### A.3. Water table level and discharge calculation

$$\begin{aligned} h(t) &= h(t-1) + \left( R(t) - K_{sat} \frac{h(t-1)^2}{l^2} \right) / \mu C \\ Q(t) &= AJ(h(t)) + (1 - A)R(t) \\ J(h(t)) &= K_{sat} \frac{h(t)^2}{l^2} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

## References

- Vincent, B., 2020. Principes techniques et chiffres du drainage agricole. De la tuyautique à l'hydro-diplomatie. *Sciences Eaux Territoires* 2, 8–15.
- Mohtadullah, K., 1990. Interdisciplinary planning, data needs and evaluation for drainage projects, Land drainage – Drainage agricole: actes du 4ème séminaire international sur le drainage, Le Caire, EGY, 23–24 février 1990. Cemagref Editions, Antony, pp. 127–140.
- Lesaffre, B., 1988. Fonctionnement hydrologique et hydraulique du drainage souterrain des sols temporairement engorgés: débits de pointe et modèle SIDRA : extension des principes théoriques de Boussinesq et Guyon, 373 p. pp.
- Tournebize, J., Kao, C., Nikolic, N., Zimmer, D., 2004. Adaptation of the STICS model to subsurface drained soils. *Agronomie* 24 (6–7), 305–313. <https://doi.org/10.1051/agro:2004030>.
- Henine, H., et al., 2010. Effect of Pipe Pressurization on the Discharge of a Tile Drainage System. *Vadose Zone J.* 9 (1), 36–42. <https://doi.org/10.2136/vzj2008.0152>.
- Henine, H., Nédélec, Y., Ribstein, P., 2014. Coupled modelling of the effect of overpressure on water discharge in a tile drainage system. *J. Hydrol.* 511, 39–48. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2013.12.016>.
- Gurovich, L., Oyarce, P., 2015. Modeling agricultural drainage hydraulic nets. *Irrig. Drain Syst. Eng.* 4, 149–158. <https://doi.org/10.4172/2168-9768.1000149>.
- Skaggs, R.W., Youssef, M., Chescheir, G.M., 2012. DRAINMOD: model use, calibration, and validation. *Trans. ASABE* 55, 1509–1522. <https://doi.org/10.13031/2013.42259>.
- Valipour, M., 2012. Effect of Drainage Parameters Change on Amount of Drain Discharge in Subsurface Drainage Systems. *IOSR J. Agricul. Veterin. Sci. (IOSR-JAVS)* 1, 10–18. <https://doi.org/10.9790/2380-0141018>.
- Alzraie, A.H., Gates, T.K., Garcia, L.A., 2013. Modeling Subsurface Heterogeneity of Irrigated and Drained Fields. II: Multivariate Stochastic Analysis of Root-Zone Hydrosalinity and Crop Yield. *J. Irrig. Drain. Eng.* 139 (10), 809–820. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)IR.1943-4774.0000587](https://doi.org/10.1061/(ASCE)IR.1943-4774.0000587).
- Bouarfafa, S., 1995. Drainage of irrigated schemes Taking into account the evaporation in drainage modeling. Université de Strasbourg.
- Bouarfafa, S., Zimmer, D., 2000. Water-table shapes and drain flow rates in shallow drainage systems. *J. Hydrol.* 235 (3–4), 264–275. [https://doi.org/10.1016/S0022-1694\(00\)00280-8](https://doi.org/10.1016/S0022-1694(00)00280-8).
- Jeanet, A., et al., 2021. Robustness of a parsimonious subsurface drainage model at the French national scale. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 25 (10), 5447–5471. <https://doi.org/10.5194/hess-25-5447-2021>.
- Henine, H., et al., 2022. Coupling of a subsurface drainage model with a soil reservoir model to simulate drainage discharge and drain flow start. *Agric. Water Manage.* 262, 107318. <https://doi.org/10.1016/j.agwat.2021.107318>.
- Blöschl, G., et al., 2019. Twenty-three unsolved problems in hydrology (UPH) – a community perspective. *Hydrol. Sci. J.* 64 (10), 1141–1158. <https://doi.org/10.1080/02626667.2019.1620507>.
- Jiang, Q., et al., 2020. Assessing climate change impacts on greenhouse gas emissions, N losses in drainage and crop production in a subsurface drained field. *Sci. Total Environ.* 705, 135969. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.135969>.
- Golmohammadi, G., et al., 2021. Assessment of Impacts of Climate Change on Tile Discharge and Nitrogen Yield Using the DRAINMOD Model. *Hydrology* 8 (1), 1. <https://doi.org/10.3390/hydrology8010001>.
- Stange, F., et al., 2000. A process-oriented model of N<sub>2</sub>O and NO emissions from forest soils: 2. Sensitivity analysis and validation. *J. Geophys. Res.: Atmos.* 105 (D4), 4385–4398. <https://doi.org/10.1029/1999jd900948>.
- Migliaccio, K., Chaubey, I., 2005. Sensitivity Analysis, Calibration, and Validations for a Multisite and Multivariable SWAT Model. *JAWRA J. Am. Water Resour. Assoc.* 41, 1077–1089. <https://doi.org/10.1111/j.1752-1688.2005.tb03786.x>.
- Razavi, S., et al., 2021. The Future of Sensitivity Analysis: An essential discipline for systems modeling and policy support. *Environ. Modell. Software* 137, 104954. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2020.104954>.
- Sobol, I.M., 1993. Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models. *Mathematical modelling and computational experiments* 1 (4), 407–414.
- Saltelli, A., 2002. Making best use of model evaluations to compute sensitivity indices. *Comput. Phys. Commun.* 145 (2), 280–297. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(02\)00280-1](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(02)00280-1).
- Cacuci, D., 1981. Sensitivity Theory for Nonlinear Systems. I. Nonlinear Functional Analysis Approach. *J. Math. Phys.* 22, 2794–2802. <https://doi.org/10.1063/1.525186>.
- Morris, M.D., 1991. Factorial sampling plans for preliminary computational experiments. *Technometrics* 33 (2), 161–174. <https://doi.org/10.2307/1269043>.
- Kucherenko, S., 2009. Derivative based global sensitivity measures and their link with global sensitivity indices. *Math. Comput. Simul.* 79 (10), 3009–3017. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2009.01.023>.
- Lamboni, M., Iooss, B., Popelin, A.-L., Gamboa, F., 2013. Derivative-based global sensitivity measures: general links with Sobol' indices and numerical tests. *Math. Comput. Simul.* 87, 45–54. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2013.02.002>.
- Gejadze, I., Malaterre, P.O., Shutyayev, V., 2019. On the use of derivatives in the polynomial chaos based global sensitivity and uncertainty analysis applied to the distributed parameter models. *J. Comput. Phys.* 381, 218–245. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.12.023>.
- Michel, C., 1989. Hydrologie appliquée aux petits bassins versants ruraux. Cemagref, Antony.
- Mathevet, T., 2005. Quels modèles pluie-débit globaux pour le pas de temps horaire? Développement empirique et comparaison de modèles sur un large échantillon de bassins versants. ENGREF (Paris): Cemagref (Antony), France, 463p.
- Abbaszadeh, P., Moradkhani, H., Daescu, D.N., 2019. The quest for model uncertainty quantification: A hybrid ensemble and variational data assimilation framework. *Water Resour. Res.* 55 (3), 2407–2431. <https://doi.org/10.1029/2018WR023629>.
- Courtier, P., et al., 1998. The ECMWF implementation of three-dimensional variational assimilation (3D-Var). I: Formulation. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 124 (550), 1783–1807. <https://doi.org/10.1002/qj.49712455002>.
- Fischer, C., Montmerle, T., Berre, L., Auger, L., Ștefănescu, S.E., 2005. An overview of the variational assimilation in the ALADIN/France numerical weather-prediction system. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 131 (613), 3477–3492. <https://doi.org/10.1256/qj.05.115>.
- Gauthier, P., Tanguay, M., Laroche, S., Pellerin, S., Morneau, J., 2007. Extension of 3DVAR to 4DVAR: Implementation of 4DVAR at the Meteorological Service of Canada. *Mon. Weather Rev.* 135 (6), 2339–2354. <https://doi.org/10.1175/mwr3394.1>.
- Nguyen, V.T., Georges, D., Besançon, G., Zin, I., 2016. Parameter estimation of a real hydrological system using an adjoint method\*\*This work has been partially supported by the LabEx PERSYVAL-Lab (ANR-11-LABX-0025-01) and the MEPIERA project. Grenoble Institute of Technology. IFAC-PapersOnLine 49 (13), 300–305. <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2016.07.978>.
- Oubanas, H., Gejadze, I., Malaterre, P.-O., Mercier, F., 2018. River discharge estimation from synthetic SWOT-type observations using variational data assimilation and the full Sait-Venat hydraulic model. *J. Hydrol.* 559, 638–647. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2018.02.004>.
- Ghorbanidehno, H., Kokkinaki, A., Lee, J., Darve, E., 2020. Recent developments in fast and scalable inverse modeling and data assimilation methods in hydrology. *J. Hydrol.* 591, 125266. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2020.125266>.
- Jay-Allemand, M., et al., 2020. On the potential of variational calibration for a fully distributed hydrological model: application on a Mediterranean catchment. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 24 (11), 5519–5538. <https://doi.org/10.5194/hess-24-5519-2020>.
- Dennis, J., John, E., Moré, J.J., 1977. Quasi-Newton methods, motivation and theory. *SIAM Rev.* 19 (1), 46–89. <https://doi.org/10.1137/1019005>.
- Arsenault, R., Poulin, A., Côté, P., Brissette, F., 2014. Comparison of stochastic optimization algorithms in hydrological model calibration. *J. Hydrol. Eng.* 19 (7), 1374–1384. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)HE.1943-5584.0000938](https://doi.org/10.1061/(ASCE)HE.1943-5584.0000938).
- Pan, L., Wu, L., 1998. A hybrid global optimization method for inverse estimation of hydraulic parameters: Annealing-simplex method. *Water Resour. Res.* 34 (9), 2261–2269. <https://doi.org/10.1029/98WR01672>.
- Skahill, B.E., Doherty, J., 2006. Efficient accommodation of local minima in watershed model calibration. *J. Hydrol.* 329 (1–2), 122–139. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2006.02.005>.
- Shoarinezhad, V., Wieprecht, S., Haun, S., 2020. Comparison of Local and Global Optimization Methods for Calibration of a 3D Morphodynamic Model of a Curved Channel. *Water* 12 (5), 1333. <https://doi.org/10.3390/w12051333>.
- Welter, D.E. et al., 2012. Approaches in highly parameterized inversion – PEST++, a Parameter ESTimation code optimized for large environmental models. 7-C5, Reston, VA. DOI:10.3133/tm7C5.
- Beven, K., 2006. A manifesto for the equifinality thesis. *J. Hydrol.* 320 (1), 18–36. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2005.07.007>.
- Goutal, N. et al., 2018. Uncertainty Quantification for River Flow Simulation Applied to a Real Test Case: The Garonne Valley, pp. 169–187. DOI:10.1007/978-981-10-7218-5\_12.
- Tallec, G., 2012. 1962–2012: cinquante ans d'observations, un bien précieux pour la recherche et les services opérationnels. *Sciences Eaux & Territoires, Cahier spécial (III)*, 2–9. <https://doi.org/10.3917/set.hs05.0002>.
- FAO, F., 2006. Agriculture Organization of the United Nations (2006) Guidelines for Soil Description, ISBN 92–5–105521-1.
- Tournebize, J., et al., 2015. Long-term nitrate removal in a buffering pond-reservoir system receiving water from an agricultural drained catchment. *Ecol. Eng.* 80, 32–45. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2014.11.051>.
- Vidal, J.-P., Martin, E., Franchistéguy, L., Baillon, M., Soubeyrou, J.-M., 2010. A 50-year high-resolution atmospheric reanalysis over France with the Safran system. *Int. J. Climatol.* 30 (11), 1627–1644. <https://doi.org/10.1002/joc.2003>.
- Hooghoudt, S., 1940. General consideration of the problem of field drainage by parallel drains, ditches, watercourses, and channels. In: *Contribution to the knowledge of some physical parameters of the soil*, p. 7.
- Augeard, B., Kao, C., Chaumont, C., Vauchin, M., 2005. Mechanisms of surface runoff genesis on a subsurface drained soil affected by surface crusting: A field investigation. *Phys. Chem. Earth.* 30 (8), 598–610. <https://doi.org/10.1016/j.pce.2005.07.014>.
- Hascoet, L., Pascual, V., 2013. The Tapenade Automatic Differentiation tool: principles, model, and specification. *ACM Trans. Math. Software* 39 (3). <https://doi.org/10.1145/2450153.2450158>.
- Gupta, H.V., Kling, H., Yilmaz, K.K., Martinez, G.F., 2009. Decomposition of the mean squared error and NSE performance criteria: Implications for improving hydrological modelling. *J. Hydrol.* 377 (1), 80–91. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2009.08.003>.

- Pechlivanidis, I., Jackson, B., McIntyre, N., Wheeler, H., 2011. Catchment scale hydrological modelling: a review of model types, calibration approaches and uncertainty analysis methods in the context of recent developments in technology and applications. *Global NEST J.* 13 (3), 193–214.
- Patil, S.D., Stieglitz, M., 2015. Comparing spatial and temporal transferability of hydrological model parameters. *J. Hydrol.* 525, 409–417. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2015.04.003>.
- Haas, M.B., Guse, B., Pfannerstill, M., Fohrer, N., 2016. A joined multi-metric calibration of river discharge and nitrate loads with different performance measures. *J. Hydrol.* 536, 534–545. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2016.03.001>.
- Santos, L., 2018. Perspectives for hydrological supermodels: evaluation of a method based on a dynamical combination of rainfall-runoff models. Doctorat en Hydrologie, AgroParisTech, p. 256.
- Reichle, R.H., 2008. Data assimilation methods in the Earth sciences. *Adv. Water Resour.* 31 (11), 1411–1418. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2008.01.001>.
- Perrin, C., Michel, C., Andréassian, V., 2003. Improvement of a parsimonious model for streamflow simulation. *J. Hydrol.* 279 (1–4), 275–289. [https://doi.org/10.1016/S0022-1694\(03\)00225-7](https://doi.org/10.1016/S0022-1694(03)00225-7).
- Coron, L., Thirel, G., Delaigue, O., Perrin, C., Andréassian, V., 2017. The suite of lumped GR hydrological models in an R package. *Environ. Modell. Software* 94, 166–171. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2017.05.002>.
- Gejadze, I., Malaterre, P.-O., 2017. Discharge estimation under uncertainty using variational methods with application to the full Saint-Venant hydraulic network model. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 83 (5), 405–430. <https://doi.org/10.1002/flid.4273>.
- Zhu, C., Byrd, R.H., Lu, P., Nocedal, J., 1997. Algorithm 778: L-BFGS-B: Fortran subroutines for large-scale bound-constrained optimization. *ACM Trans. Math. Software (TOMS)* 23 (4), 550–560. <https://doi.org/10.1145/279232.279236>.
- Tremolet, Y., 2006. Accounting for an imperfect model in 4D-Var. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 132 (621), 2483–2504. <https://doi.org/10.1256/qj.05.224>.
- Beal, M.J., 2003. Variational algorithms for approximate Bayesian inference. University of London, University College London (United Kingdom).
- Duan, Q., Sorooshian, S., Gupta, V., 1992. Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models. *Water Resour. Res.* 28 (4), 1015–1031. <https://doi.org/10.1029/91wr02985>.
- Klemeš, V., 1986. Operational testing of hydrological simulation models. *Hydrol. Sci. J.* 31 (1), 13–24. <https://doi.org/10.1080/02626668609491024>.
- Henriksen, H.J., et al., 2003. Methodology for construction, calibration and validation of a national hydrological model for Denmark. *J. Hydrol.* 280 (1), 52–71. [https://doi.org/10.1016/S0022-1694\(03\)00186-0](https://doi.org/10.1016/S0022-1694(03)00186-0).
- Guo, D., Zheng, F., Gupta, H., Maier, H.R., 2020. On the Robustness of Conceptual Rainfall-Runoff Models to Calibration and Evaluation Data Set Splits Selection: A Large Sample Investigation. e2019WR026752 *Water Resour. Res.* 56 (3). <https://doi.org/10.1029/2019WR026752>.
- Kenney, J.F., 1939. Mathematics of statistics. D. Van Nostrand.
- Nash, J.E., Sutcliffe, J.V., 1970. River flow forecasting through conceptual models part I—A discussion of principles. *J. Hydrol.* 10 (3), 282–290. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(70\)90255-6](https://doi.org/10.1016/0022-1694(70)90255-6).
- Lagacherie, P., 1987. Synthèse générale sur les études de secteur de référence drainage, irstea.
- Iooss, B., Lemaitre, P., 2015. In: A review on global sensitivity analysis methods, Uncertainty management in simulation-optimization of complex systems. Springer, pp. 101–122. [https://doi.org/10.1007/978-1-4899-7547-8\\_5](https://doi.org/10.1007/978-1-4899-7547-8_5).
- Zhang, X.Y., Trame, M.N., Lesko, L.J., Schmidt, S., 2015. Sobol Sensitivity Analysis: A Tool to Guide the Development and Evaluation of Systems Pharmacology Models. *CPT Pharmacometrics Syst. Pharmacol.* 4 (2), 69–79. <https://doi.org/10.1002/psp4.6>.
- Viana, F.A.C., 2016. A Tutorial on Latin Hypercube Design of Experiments. *Qual. Reliab. Eng. Int.* 32 (5), 1975–1985. <https://doi.org/10.1002/qre.1924>.
- Manache, G., Melching, C.S., 2004. Sensitivity Analysis of a Water-Quality Model Using Latin Hypercube Sampling. *J. Water Resour. Plann. Manage.* 130 (3), 232–242. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9496\(2004\)130:3\(232\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9496(2004)130:3(232)).
- Zimmer, D., Lorre, E., Lesaffre, B., 1995. Parameter sensitivity and field evaluation of SIDRA model. *Irrig. Drainage Syst.* 9 (3), 279–296. <https://doi.org/10.1007/BF00880868>.
- Jamagne, M., Betremieux, R., Begon, J.C., Mori, A., 1977. Quelques données sur la variabilité dans le milieu naturel de la réserve en eau des sols. *Bull. Technique d'Information* 324–325, 627–641.
- Goulet, E., Morlat, R., Rioux, D., Cesbron, S., 2004. A calculation method of available soil water content : application to viticultural terroirs mapping of the Loire valley. *OENO One* 38 (4), 231–235. <https://doi.org/10.20870/oeno-one.2004.38.4.913>.
- Antoulas, A.C., 2005. Approximation of large-scale dynamical systems. *SIAM* 10 (1137/1), 9780898718713.
- Altaf, M.U., El Gharamti, M., Heemink, A.W., Hoteit, I., 2013. A reduced adjoint approach to variational data assimilation. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 254, 1–13. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2012.10.003>.
- LeGresley, P., Alonso, J., 2000. Airfoil design optimization using reduced order models based on proper orthogonal decomposition. In: *Fluids 2000 Conference and Exhibit*. <https://doi.org/10.2514/6.2000-2545>.
- Turunen, M., Gurarslan, G., Šimůnek, J., Koivusalo, H., 2020. What is the worth of drain discharge and surface runoff data in hydrological simulations? *J. Hydrol.* 125030 <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2020.125030>.
- Hoteit, I., 2008. A reduced-order simulated annealing approach for four-dimensional variational data assimilation in meteorology and oceanography. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 58 (11), 1181–1199. <https://doi.org/10.1002/flid.1794>.
- Chossat, J.C., Saugnac, A.M., 1985. Relation entre conductivité hydraulique et porosité de drainage mesurées par la méthode du puits et des piézomètres. *Sciences du sol* 3, 151–167.



## **Chapitre III.2 : Le potentiel de l'assimilation de données variationnelle quant à l'amélioration de l'estimation du stock d'azote potentiellement lixiviable du sol : cas du modèle NIT-DRAIN**

---

Ce chapitre est rédigé sous forme d'article scientifique. Il sera soumis prochainement dans une revue internationale à comité de lecture.

Les travaux portent sur l'intérêt de l'implémentation de l'assimilation de données variationnelle au sein du modèle conceptuel de transfert des nitrates en milieu agricole artificiellement drainé (NIT-DRAIN). Nous proposons d'analyser, dans un premier temps, l'impact des paramètres d'entrée de ce modèle sur la dynamique des concentrations en nitrate. Pour cela, nous avons appliqué la méthode d'analyse de sensibilité globale faisant intervenir le code adjoint au modèle qui a été généré en utilisant l'outil de différentiation automatique TAPENADE. Ensuite, nous nous sommes intéressé à l'étude de l'impact de la fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrate sur la qualité des reliquats entrée hiver estimés par le modèle NIT-DRAIN. Finalement, l'implémentation de l'assimilation de données variationnelle a permis l'estimation de l'évolution temporelle du stock d'azote disponible en faible profondeur du sol. Ainsi, la présence de la fertilisation printanière a pu être constatée puis quantifiée sous réserve de disponibilité des données de concentration en nitrate.

# Improving the estimates of nitrate storage in the tile-drained agricultural soils: the potential of variational data assimilation using the NIT-DRAIN model

5 Samy CHELIL<sup>1</sup>, Hind OUBANAS<sup>2</sup>, Hocine HENINE<sup>1</sup>, Igor GEJADZE<sup>2</sup>, Pierre Olivier MALATERRE<sup>2</sup> and Julien TOURNEBIZE<sup>1</sup>

<sup>1</sup> University of Paris-Saclay, INRAE Jouy-en-Josas - Antony, UR HYCAR, Antony, France

<sup>2</sup> G-EAU, Univ Montpellier, AgroParisTech, BRGM, CIRAD, IRD, INRAE, Institut Agro, Montpellier, France

10 **Corresponding author:** Julien TOURNEBIZE ([julien.tournebize@inrae.fr](mailto:julien.tournebize@inrae.fr))

## Abstract

Nitrogen mineralization and fertilization occurring between the spring and the summer seasons lead to the accumulation of a large quantity of nitrate within the upper soil layers of subsurface agricultural fields. This nitrate pool is highly exposed to the fast leaching effect following the first winter rainfalls. This paper presents the first implementation of variational data assimilation method on the NIT-DRAIN conceptual model. This recently developed model allows for the correct simulation of the nitrate exportation from agricultural subsurface drained catchments involving the temporal nitrate storage estimation within the upper soil layers.

First, the influence of the NIT-DRAIN input parameters on the model output (i.e., nitrate concentrations) was investigated using the global adjoint sensitivity analysis. The implementation of this approach requires the availability of the NIT-DRAIN adjoint code, which has been generated using the TAPENADE automatic differentiation tool. Results demonstrated that NIT-DRAIN simulations are most sensitive to the parameter  $\theta$ , which corresponds to the water content at the field capacity. Hence, it is crucial to estimate correctly this parameter due to its main role on governing the nitrate exportation occurring after the first winter rainfalls and the application of mineral fertilizers.

Second, the estimation of the nitrate soil storage (during the spring-summer seasons, in particular) was performed using 4D-Var data assimilation method. Hence, the preliminary results indicate that the variational assimilation of the nitrate concentration observations

enables the update of the nitrate storage value (i.e., quantity of nitrate available for leaching) during the spring-summer seasons. The fast nitrate storage update during this period could be associated to the application of mineral fertilizers and the significant contribution of the  
35 biogeochemical nitrogen interactions.

In addition, a simple statistical method was employed to assess the impact of the nitrate concentration sampling frequency on the estimation quality of the remaining nitrate pool at the beginning of the winter season (RNBW). This experimental set up aims at determining the minimal threshold of nitrate concentration sampling that is needed to estimate correctly the  
40 RNBW variable. It was demonstrated that decadal sampling frequency could be sufficient to achieve both good nitrate concentration simulations ( $NSE > 0$ ) and low RNBW estimation relative errors ( $< 8 \%$ ).

## 1. Introduction

45 The last century was marked by a major change in the agricultural management practices including extensive spread of fertilizers over a large part of agricultural areas (Craswell, 2021). These practices are supported by the constant need of crop yield improvement to cope with the global growing food demand (Tilman et al., 2011). Such a nonpoint source of pollution involves a considerable exposure of groundwater and rivers to nitrate leaching  
50 phenomena (Muhammed et al., 2018). In addition, legacy effect of nitrogen as described by Van Meter et al. (2016) limits our understanding about the real nitrate accumulation in the soil at the seasonal scale. In all cases, the negative environmental impact resulting from the high nitrate surpluses in agricultural soils could be substantial if no reliable and efficient solutions are applied to decrease the nitrate leaching (Di and Cameron, 2002; Wang and Li, 2019). This  
55 impact could be much more substantial when the agricultural soil is artificially drained (Skaggs et al., 1994). The Best Management Practices (BMPs) including fertilizer optimization (Williams et al., 2022), controlled drainage (Pease et al., 2017) and design of constructed wetlands (Tournebize et al., 2017) allow reducing the pollution of the natural water resources (Chen et al., 2001; Ruidisch et al., 2013; Haas et al., 2017).

60 According to Birgand et al. (2011), the optimal implementation of the BMPs relies on the availability of high frequency observations in order to avoid the uncertainty effect. The sampling frequency of the water quality markers (e.g., Nitrate, phosphorus, pesticide) depends on the monitoring purposes. One can focus on the dynamics component based on high-frequency measurements to identify the transfer mechanisms and pollutant pathways through  
65 the soil matrix (Burns et al., 2019; Liu et al., 2020; Liu et al., 2021). Others seek to monitor pollutants over long-term trends to estimate the environmental impact of climate change (Jiang et al., 2020; Golmohammadi et al., 2021) or agricultural practices (de Paz and Ramos, 2004; Schnebelen et al., 2004), for instance. Nowadays, high frequency data acquisition is gaining in popularity (Duan et al., 2014) but still not always accessible because of the high  
70 cost of the monitoring equipment and maintenance. In addition, the water-quality measurement programs often requires a field operator to collect data and ensure the smooth execution of the sampling campaign. All of these restrictions result in limited availability of data and low sampling frequencies. Several studies have explored the impact of low sampling frequencies of nitrate using statistical approaches (Birgand et al., 2010; Birgand et al., 2011; Ferrant et al., 2013). The purpose was to quantify the uncertainty resulting from the use of  
75 several data sampling frequency. To simplify the result analysis, numerical indicators (e.g.,

mean or extreme concentration value), extracted from the highest available sampling frequency, have been defined as a benchmark.

An alternative to the expensive and laborious field sampling measurements consists in using  
80 the water quality models (Moriasi et al., 2012; Moriasi et al., 2015) to generate high  
frequency nitrate concentrations and flux simulations. The reliability of this solution is subject  
to the adequate estimation of the model inputs over a representative period. The estimation of  
the pollutant storage capacity and exportation from the upper soil layers towards natural  
hydrological components (i.e., watercourses, groundwater) might be achieved using several  
85 modeling approaches. One can note models integrating most of the complex biogeochemical  
interactions to simulate nitrate leaching such as DNDC (Smith et al., 2020) and RZWQM2  
(Ma et al., 2012), as well as agronomic models such as STICS (Brisson et al., 2003) which  
requires the availability of crop data and a good knowledge of agricultural practices.

Other process-based models such as NOPOLU (Schoumans et al., 2009) and Nutting-N  
90 (Dupas et al., 2013; Dupas et al., 2015) calculate the yearly N-surplus of the soil (agricultural  
pressure) using the mass balance approach. These biogeochemical models enable a good  
representation of the Nitrogen surplus at large scales (e.g., regional, national). In addition, the  
amount of nitrate could be measured at the field scale between September and November  
(before the first winter rainfall episodes) in order to assess the nitrate available for leaching.  
95 Hence, several soil samplings are carried out at the local scale using a soil auger in order to  
assess the available quantity of nitrate in the soil. At this period of the year, the superficial  
soil layers are generally overloaded with nitrate resulting from high nitrification, nitrogen  
mineralization and the excessive use of chemical N fertilizers (Huang et al., 2017).

Among the low complexity modeling approaches, one can note the conceptual water quality  
100 models, which include generally a notable simplification of the pollutant transfer and  
transformation processes. Some of these models offer a simple framework to predict solute  
concentration and leaching using a parsimonious number of data and input parameters  
(Branger et al., 2009; Chelil et al., 2022a).

Conceptual models could be exposed to a large number of parameters, part of which may be  
105 poorly defined. Perrin et al. (2001) demonstrated that over-parametrization does not necessary  
enhance the modeling performance, and thus the quality of simulations. Hence, it might be  
useful to reduce the size of the input parameters to be estimated. In this case, sensitivity  
analysis (SA) may be a powerful tool to identify the influence of each model input on the

model outputs (Cacuci, 1981; Gan et al., 2014). Several SA methods have been discussed in  
110 the literature (Christopher Frey and Patil, 2002). In particular, the Sobol's approach is one of  
the most recognized statistical SA methods within the modeling community (Sobol, 1993;  
Zhang et al., 2015). It has been recently used to identify and select the most impacting  
SIDRA-RU model parameters on the drainage discharge simulations (Henine et al., 2022).  
However, Sobol SA still suffers from several limitations such as the high computational  
115 resources, required in the case of high dimensional inputs. The adjoint sensitivity analysis is a  
valuable alternative, with a very low computational requirements and a higher accuracy in  
terms of the sensitivity quantification. In fact, all sensitivities of one model output to all  
model inputs are computed within a single model run (Allaire, 2015). The successful  
application of the adjoint SA approach in assessing the sensitivity of several hydrological  
120 models (Goutal et al., 2018; Chelil et al., 2022b) could be mentioned as an illustrative  
example.

Among the existing automatic optimization algorithms performed to calibrate the input model  
parameters (Gupta et al., 1999; Zhang et al., 2009; Arsenault et al., 2014), data assimilation  
methods have been getting more interest from the geophysical scientific community (Reichle,  
125 2008). These methods are used to estimate, in an optimal way, the unknown model inputs by  
accounting for all available information. It includes observations, a priori knowledge  
(expertise), the dynamical behavior of the system represented by the involved model, and the  
uncertainties of each components. Among the existing data assimilation techniques,  
variational data assimilation (4D-Var) has been implemented in several hydrological and  
130 hydraulic models as it demonstrates high stability and robustness to strong uncertainties often  
encountered in similar applications (Nguyen et al., 2016; Oubanas et al., 2018a; Oubanas et  
al., 2018b; Ghorbanidehno et al., 2020; Jay-Allemand et al., 2020; Chelil et al., 2022b).  
Previous applications of 4D-Var involving the water quality models remain scarce. A recent  
review highlights the interest of implementing data assimilation techniques on water quality  
135 models, in particular, in terms of model prediction improvement and uncertainty  
quantification (Cho et al., 2020).

In this paper, the adjoint counterpart of the NIT-DRAIN conceptual model (Chelil et al.,  
2022a) is generated using the automatic differentiation tool TAPENADE (Hascoet and  
Pascual, 2013). First, we assess the impact of the NIT-DRAIN input parameters on the nitrate  
140 concentration simulations (outputs) using the global adjoint sensitivity analysis (GASA).  
Then, the variational data assimilation is implemented to improve the estimation of (1) the

remaining pool of nitrate at the beginning of the winter season (RNBW), and (2) the temporal evolution of the soil nitrogen pool of the soil during the entire hydrological season. Furthermore, the RNBW estimation uncertainty is explored by considering various sampling  
145 frequencies of the nitrate concentration observations. The main objective is to identify a minimal sampling frequency that enables estimating RNBW with a reasonable accuracy level. In our experiments, the model inputs, including the hourly nitrate storage and the annual RNBW values, are estimated using six years of hourly nitrate concentration observations carried out at the Rampillon subsurface drained agricultural catchment (355 ha).

## 150 2. Materials and methods

This paper focuses on improving the estimates of the temporal evolution of nitrate soil storage at the agricultural catchment scale. This quantity is incorporated as an input variable of the conceptual nitrate transfer model (NIT-DRAIN), which has been first introduced in (Chelil et al., 2022a). First, the global adjoint sensitivity analysis is performed to identify the most  
155 influential input parameters on the model output (nitrate concentrations). Then, the variational data assimilation method (4D-Var) is implemented on the NIT-DRAIN model to estimate the evolution of the nitrate quantity in the soil given the two configurations:

- i. Estimation of the initial nitrate storage value (i.e., RNBW) through data assimilation, from which the temporal variation of the nitrate storage is simulated using the forward  
160 model;
- ii. Estimation of the temporal variation of the nitrate storage directly through data assimilation method.

In both cases, we consider the yearly calibrated set of parameters extracted from (Chelil et al. (2022a)). Also, the uncertainty derived from the yearly estimation of the RNBW variable is  
165 assessed for various nitrate concentrations sampling frequencies. A flowchart is embedded to describe the guiding thread of this paper (Figure 1).

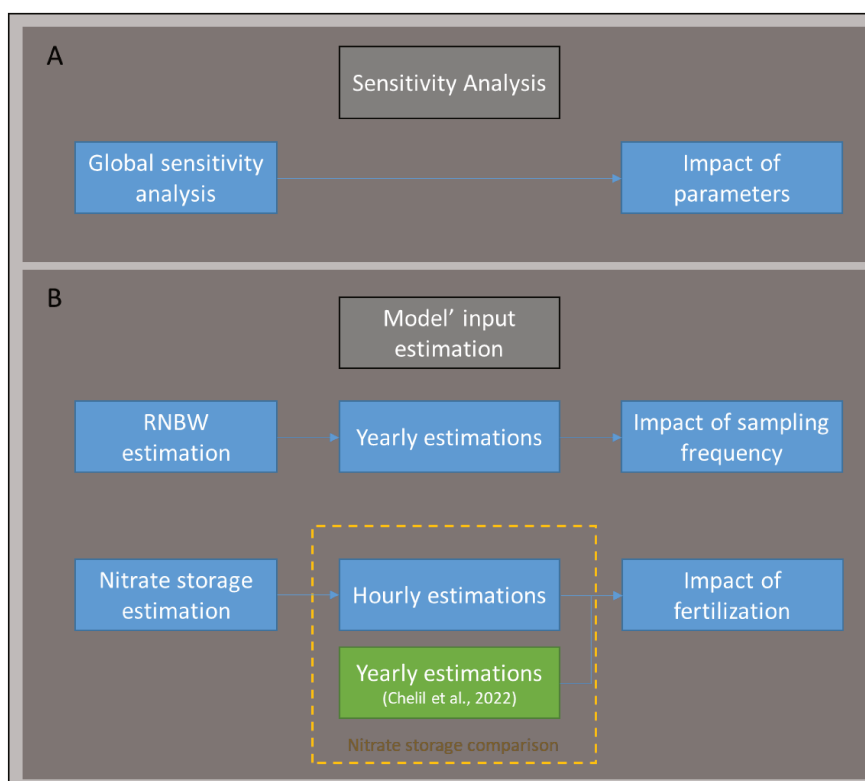


Figure 1: A flowchart clarifying the two subsections of the study; A) application of the global adjoint sensitivity analysis to determine the influential model parameters; B) application of the 4D-Var method to estimate the inputs of the NIT-DRAIN model

170

## 2.1. Field and data descriptions

Nitrate concentrations and drainage discharge observations (Figure 4) have been recorded at the outlet of the *Rampillon* agricultural field (355 ha) at the time step of 15 minutes. The collected data have been averaged at the hourly time step for modeling purposes. The studied area is constituted of fully subsurface drained agricultural parcels. The agricultural catchment of *Rampillon* is located 70 km southeast of Paris (03°03'37.300E, 48°32'16.700N), France (Figure 2). The entire area takes part of the *Ancoeur* agricultural catchment (132 km<sup>2</sup>). The corresponding soil, which is mainly luvisol (Tournebize et al., 2012; Mander et al., 2021), is artificially drained using an ensemble of perforated pipes buried at a depth of 90 cm in average and lying on a clayey soil layer.

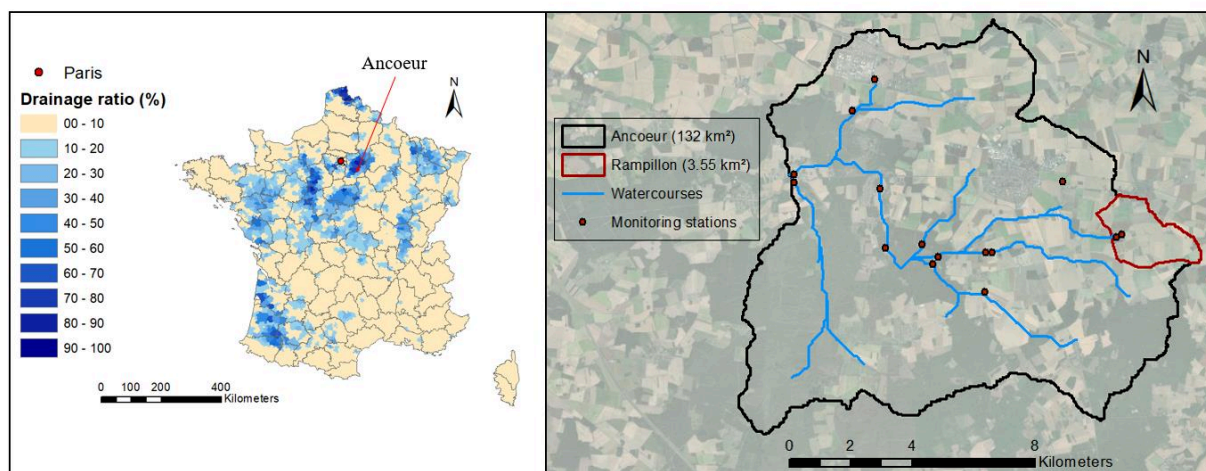
180

The studied region is composed of four seasons, including a summer and a winter marked by moderate ( $T \approx 18\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) and low ( $T \approx 3\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) temperatures, respectively. The local climate is oceanic and temperate with a mean annual temperature and rainfall of 10.5 °C and 689 mm, respectively. The six years of data (2014-2020) cover both dry and wet seasons. One can consider 2016-2017 (Figure 4C) and 2017-2018 (Figure 4D) as dry and wet hydrological years, respectively. Contrasted values of precipitation (i.e. 692 mm and 900 mm, respectively) and cumulative drained water (89 mm and 485 mm, respectively) have been recorded on these

185

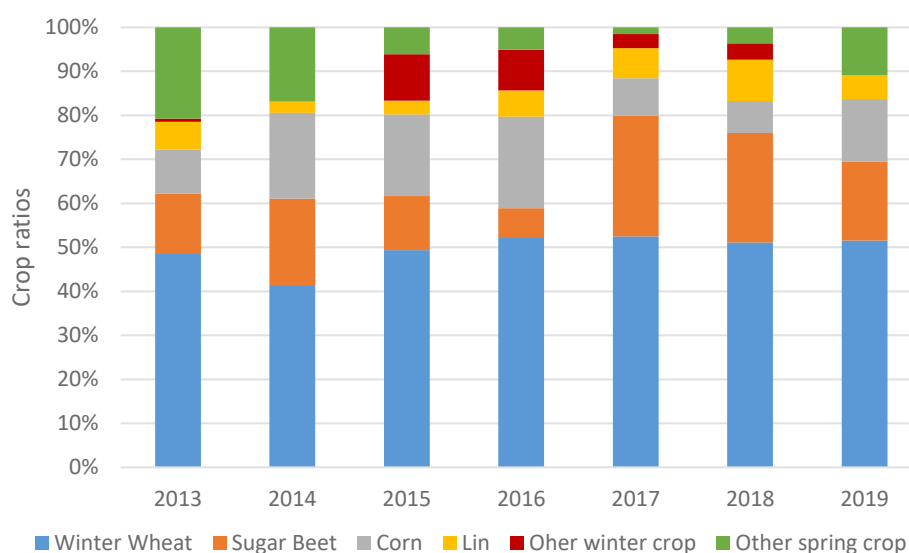


two particular years. For more details about the site description and data, please refer to Tournebize et al. (2012) and Lebrun et al. (2019).



190 *Figure 2: The "Rampillon" agricultural field and its general location, "Seine et Marne department", France. The monitoring stations includes flow and water quality measurements (e.g., nitrate concentrations)*

Winter wheat crop represents about 50% of the total agricultural field (Figure 3). *Rampillon* parcels are tilled mainly following the crop rotation: winter wheat, sugar beet, corn, beans, and rape. To ensure the best crop yield, spring mineral fertilizers involving  $\text{NH}_4:\text{NO}_3$  ratio of 1:1 are spread over the tilled agricultural area. Artificial fertilization is mainly used as an agricultural practice to allow for the compensation of the potential deficiency in the quantity of nitrate stored at the superficial cropped soil depths during the growing season.



200 *Figure 3: Ratio of crops farmed at Rampillon parcels between 2013 and 2019*

The total quantities of fertilizer spread over the cropped area of *Rampillon* during the spring season are summarized in Table 1. The fertilizer are applied between February and May.

However, no application was recorded during the February 2017 month. One can observe that the total amount of fertilizers spread between March and May is within the same range (170-220 KgN/ha). The ratio between the nitrate lixiviation and fertilization is obtained by dividing the lixiviation occurring between February and May over the total amount of fertilizers applied during the same period. The mean proportion of nitrate lixiviation to the total fertilization spread over the three years of interest approximates 5%. Despite being a relatively low proportion, it represents about 10 KgN/ha per year, which is equal to 3550 Kg of nitrate exported by drains from the agricultural soil of *Rampillon* during the spring season.

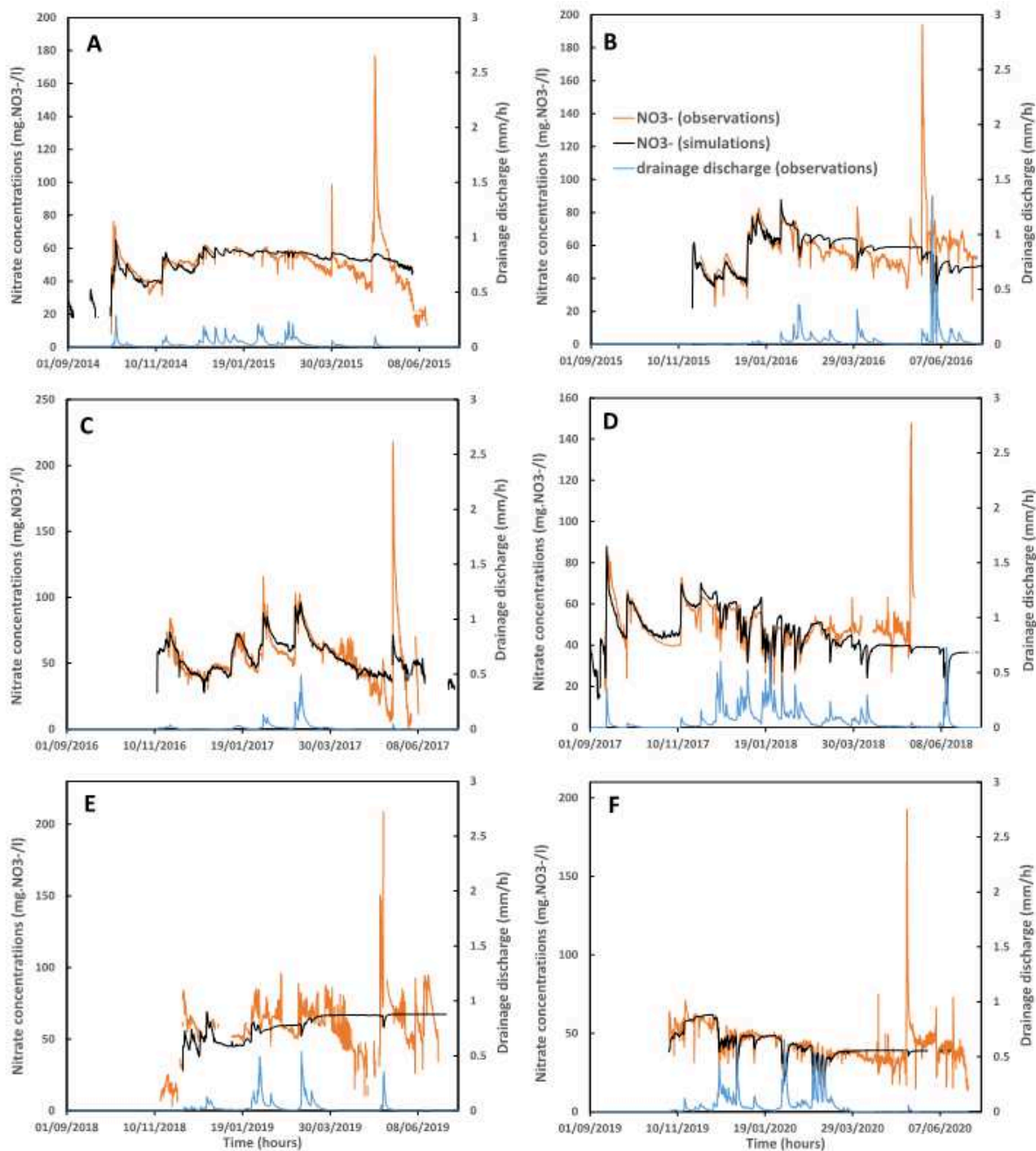
Table 1: Amount of fertilizers spread during the spring season to improve the *Rampillon* soil fertility. The amounts are gathered by months and per years of application (\*calculated on Feb-May period)

Years	Fertilization (KgN/ha)					(KgN/ha)	(%)
	February	March	April	May	Total fertilization amount	Nitrate lixiviation*	Ratio Lixiviation/fertilization*
2017	-	79.3	50.8	41.4	171.5	7.1	4.1
2018	75	108	70	45	298	15.6	5.2
2019	41	87	53.5	32.8	214.4	11.5	5.4

Through the recorded dataset, one can observe the occurrence of contrasted flushing and dilution patterns. Thus, flushing patterns are observed when nitrate concentrations and drainage discharge values increase simultaneously while dilution patterns occur when discharge and concentration show an opposite behavior (i.e. an increase of discharge with a decrease of nitrate concentrations). In general, the main flushing episodes are observed at the beginning of the hydrological year when the soil is not yet fully saturated by water as mentioned by Jacobsen and Kjær (2007). Similar flushing patterns may occur during the spring period indicating the potential leaching of high nitrate quantities initially stored inside shallow soil layers (Figure 4). This behavior could be explained by the prior spread of significant amounts of chemical fertilizers during the spring season. One can refer to Section 2.2 to get more details about the heterogeneous nitrate transfer pathways in the context of agricultural drained soils. The *Rampillon* dataset presents various conditions to study as it gathers nitrate concentrations flushing and dilution patterns and contrasted weather conditions. Hence, it allows a complete analysis with reliable statements.

Figure 4 shows the nitrate concentration observations as well as simulations (orange and dark lines, respectively), and the corresponding drainage discharge observations. An increase in nitrate concentration is systematically observed during the month of May of each year. These

230 fast nitrate-flushing patterns are generally noticed after the fast accumulation of nitrate in the upper soil layers during the spring season. Note the interruption of nitrate concentrations data acquisition few hours after the pic of May 2018 due to a sensor technical issue. This lack of data will not affect the following investigations.



235 *Figure 4: Nitrate concentration observations and simulations (orange and black, respectively), and drainage discharge observations (blue) between 2014 and 2020 at Rampillon agricultural field*

Nitrate concentration simulations have been carried out using the standard yearly-calibration routine of the NIT-DRAIN parameters during the winter period (ranging between September and February). One can notice the good quality of nitrate concentration simulations during the winter seasons, however, this is not the case in the spring seasons starting from March.

240

Indeed, the present structure of the model allows considering the nitrate transfer through agricultural drained soils, but not the complex biogeochemical interactions. These processes become dominant starting from the spring season due to the crop growth (i.e., biological activities), high temperatures, and agricultural practices intensification (e.g., fertilizations).  
 245 Hence, embedding an agronomical module to NIT-DRAIN may address this issue but would increase the modeling complexity and, potentially, would require additional data, which are not always available at the field scale.

For more details about the pre-calibrated parameter values, the employed calibration algorithm, and the quality of simulations please refer to Chelil et al. (2022a).

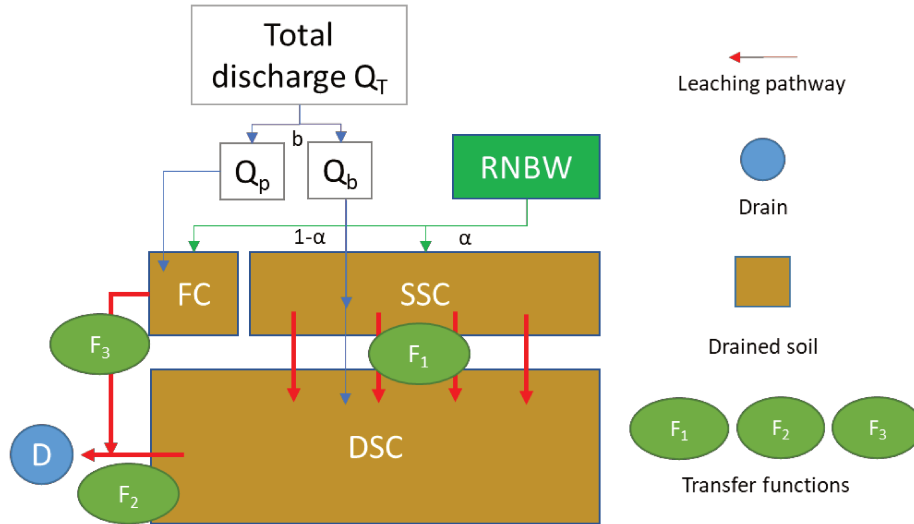
## 250 2.2. The NIT-DRAIN model

The NIT-DRAIN model (NITrate DRAINage) allows both, the simulation of the nitrate concentrations and the estimation of the quantity of nitrate available for leaching through shallow soil layers. NIT-DRAIN simulations cover the agricultural drained catchment scale and require a limited number of inputs (variables and parameters). Thus, the drainage  
 255 discharge values (observed or simulated) are introduced as model input to govern the nitrate transfer between the soil surface and the drain outlet. Seven input parameters are defined to regulate the amount of nitrate exportation considering different nitrate transfer velocities (Table 1).

*Table 2: The NIT-DRAIN model parameters*

Parameter	Details	Unit	Bounds
$\alpha$	Coefficient Sharing the RNBW between FC and SSC compartments	(-)	]0, 1[
$v_{l1}$ and $v_{l2}$	The transfer velocities of nitrate from SSC and DSC compartments	m/h	]0, + $\infty$ [
$\theta$	Volumetric water content at field capacity	(-)	]0, 0.1[
$p_1$ and $p_2$	Weighting coefficient used to modulate the quantity of nitrate exported from SSC and DSC	(-)	]0, 10[
$p_3$	Soil layer depth	m	[0.5, 1.5[

260 NIT-DRAIN model is based on a conceptual approach involving three interconnected compartments (FC, SSC, and DSC) to describe the heterogeneous water and nitrate transfers (i.e. macropores and residual flows) through the soil profile located between the drain and the mid-drain (Figure 4). Thus, FC and SSC/DSC compartments are responsible for fast and slow nitrate transfers, respectively.



265

Figure 5: Simplified scheme of the NIT-DRAIN model structure

Given the decomposition of the soil into three conceptual compartments, the drainage discharge variable is distributed accordingly. Thus, the total drainage discharge value  $Q_T$  is decomposed into low  $Q_b$  and high  $Q_p$  discharge components, using the coefficient  $\beta$ .

270

$$\begin{aligned} Q_b(t) &= \beta * Q_T(t) \\ Q_p(t) &= (1 - \beta) * Q_T(t) \end{aligned} \quad (1)$$

275

Let us define  $Nit(t)$  as the sum of the nitrate available in the FC and SSC compartments at time (t). The initial value of this variable  $Nit(0)$  consists of the RNBW, which is estimated by the NIT-DRAIN model on September 1<sup>st</sup> of each year. This input variable describes the available quantity of nitrate for leaching at the beginning of the drainage season. Furthermore, RNBW values are shared between the FC and the SSC compartments through the parameter  $\alpha$  and the residual nitrate quantity in the DSC compartment is reset to zero at the beginning of each hydrological year.

$$\left\{ \begin{aligned} Nit(0) &= RNBW = S1(0) + S2(0) \\ S1(0) &= (1 - \alpha) * Nit(0) \\ S2(0) &= \alpha * Nit(0) \\ \alpha &\in [0,1] \end{aligned} \right. \quad (2)$$

280

Two transfer functions have been derived and adapted from the literature in order to consider the existing dual permeability in drained soils (Gerke and Maximilian Köhne, 2004; Branger et al., 2009; Frey et al., 2016). Therefore, Burn's transfer function ((Burns, 1975, 1976); Eq. 5) manages the preferential exportation of nitrate (above the drain) from the fast compartment (FC). The rest of the transport is managed by the exponential transfer function ((Jury and Roth, 1990; Magesan et al., 1994); Eqs 3 and 4), which describes the progressive exportation

285 of the residual nitrates from the superficial and deep slow compartments (i.e. SSC and DSC, respectively).

$$F_1(t) = S1(t) * p_1 \left( 1 - \exp\left(\frac{Q_b(t)}{vl_1}\right) \right) \quad (3)$$

$$F_2(t) = S2(t) * p_2 \left( 1 - \exp\left(\frac{Q_b(t)}{vl_2}\right) \right) \quad (4)$$

$$F_3(t) = S3(t) * \left( \frac{Q_p(t)}{Q_p(t) + \theta * \Delta z} \right)^{p_3 / \Delta z} \quad (5)$$

290 Where  $vl_1$  and  $vl_2$  correspond to the nitrate transfer velocities from the SSC and DSC compartments, respectively;  $\theta$  to the volumetric water content at the field capacity, and  $S1$ ,  $S2$ , and  $S3$  are the quantity of nitrate stored in SSC, DSC, and FC, respectively. The coefficients  $p_1$  and  $p_2$  modulate the quantity of nitrate exported, respectively, from SSC and DSC compartments.  $\Delta z$  and  $p_3$  correspond, respectively, to the depth increment and the soil  
295 depth of the FC compartment.

One of the main strengths of this nitrate model consists on the simplicity of its structure while maintaining a good representation of the system dynamics. Hence, the initial quantity of nitrate (i.e. RNBW) is gradually transferred to the drain outlet, given the drainage discharge and the model parameter values. The amount of nitrate exported from both compartments  
300 DSC and FC represents the total simulated nitrate flux per unit of time. The nitrate concentration values are then calculated by dividing the nitrate flux by the total drainage discharge.

In addition, the model describes flushing and dilution patterns through the consideration of contrasted nitrate transfer velocities. First, flushing episodes are mainly observed following  
305 the first rainfall events of the hydrological year. It indicates the availability of a high nitrate load at low soil depths. In this respect, Burns equation describes the relatively high transfer velocity through the macropores located close to the drain. This flushing behavior is supported by the fast compartment of the model (FC) and the transfer function ( $F_3$ ). Second, the dilution episodes occur when the nitrate quantity in the FC compartment is low which  
310 limits its impact on the total simulated nitrate concentrations. Therefore, dilution patterns take over, supported by the exportations resulting from the nitrate transfer through the two slow compartments (SSC and DSC).

Given the technical assumptions that have been made when validating NIT-DRAIN using  
 315 observations, we only considered the simulation period from September to February (Chelil et  
 al., 2022a). At this period of the year, the air temperature is low which reduces the  
 biogeochemical interactions affecting the N-turnover. In addition, the most part of nitrate  
 leaching supported by the high amount of rainfall is mainly observed during the winter season  
 ranging from September to February (Kladivko et al., 1991).

320 Let us note that spring chemical fertilizations of the soil, and the denitrification process  
 occurring generally under medium and high temperatures, have not been considered within  
 the first version of the NIT-DRAIN model (Chelil et al., 2022a). The use of variational data  
 assimilation method in this study allows us to account for the impact of the spring fertilization  
 and other biogeochemical interactions on the total nitrate mass balance. Hence, the total  
 325 period of the year is simulated subject to the availability of the nitrate concentrations and the  
 drainage discharge data.

### 2.3. Adjoint sensitivity analysis

The NIT-DRAIN model requires the drainage discharge as a forcing data in addition to the  
 RNBW input variable and seven input parameters. The assessment of the model parameter  
 330 values remains difficult, even though a mean yearly-calibrated parameters (taking into  
 account the six years of data) could be considered as sufficient to simulate correct values of  
 nitrate concentrations (Chelil et al., 2022a). Hence, a global adjoint sensitivity analysis  
 (GASA) is implemented in order to assess the impact of each parameter on the model  
 response through the consideration of a valuable function  $J$ . The GASA needs the availability  
 335 of the adjoint model which has been derived using the TAPENADE automatic differentiation  
 tool (Hascoet and Pascual, 2013). The NIT-DRAIN adjoint model is able to evaluate the  
 gradient of  $J$  allowing then the exact computation of the model output sensitivities with  
 respect to all model inputs.

Let us consider a model  $M$  that transforms an input vector  $I$  into an output vector  $X$ :

$$340 \quad M(I) = X \quad (6)$$

Then, one can state that the input vector  $I$  of the NIT-DRAIN model is composed of the  
 drainage discharge data  $Q(t)$ , the *RNBW* variable, and the vector of parameters  $U$ :

$$I = \{Q(t), RNBW, U\} \quad (7)$$

In the present work, we use drainage discharge observations, which are assumed known with  
 345 good accuracy. Further work will investigate the use of simulated drainage discharge or its  
 estimation through DA. The input parameter vector  $U$  is defined as follows:

$$U = \{\alpha, vl_1, vl_2, \theta, p_1, p_2, p_3\} \quad (8)$$

The model response  $X$  represents the temporal evolution of the nitrate concentrations  $C_N(t)$ :

$$X = C_N(t) \quad t \in [0, T] \quad (9)$$

350 Note that the nitrate concentration observations  $X^*$  are available at the same model time steps  
 and resolution. Therefore, no model-observation mapping is required.

The GASA investigates the influence of the input variabilities on the output variance through  
 the estimation of Sobol indices. The adjoint-based global SA, implemented in this paper,  
 highlights a generalized relationship between the global sensitivity indices and the  
 355 Polynomial Chaos coefficients as described in (Gejadze et al., 2019). The variability of the  
 model inputs is characterized using a sample of random vectors from a uniform distribution.  
 This choice is justified by the lack of informative a priori data of  $U$ . Therefore, a random  
 sample using a uniform distribution is considered around defined bounds  $[a_i, b_i]$  for each  
 element of  $U$  as follows:

$$360 \quad \xi_i = (b_i - a_i) * \varepsilon_i + a_i \quad \varepsilon_i \sim u(0,1) \quad (10)$$

The NIT-DRAIN model uses a simple conceptual approach and remains relatively  
 inexpensive in terms of computational requirements. Thus, it is possible to select a  
 sufficiently large sample size while paying attention to compromise between the stability of  
 the sensitivities and the CPU time.

365 In this study, the Kling-Gupta Efficiency (KGE, (Gupta et al., 2009)) is selected as the  
 valuable function  $J$ . This metric includes the observations, which are usually used as a  
 reference data to assess the quality of the model outputs. KGE has been widely used to  
 evaluate the performance of the hydrological and water quality models (Liu et al., 2017;  
 Santos, 2018; Piniewski et al., 2019; Jeantet et al., 2021; Henine et al., 2022). The KGE  
 370 metric includes the standard deviation, Pearson correlation coefficient, and the mean  $\bar{X}$  and  $\bar{X}^*$   
 of the simulated  $X$  and observed  $X^*$  data, respectively (Eq. 11).



$$J(X, X^*) = 1 - \sqrt{\left( \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(X_i^* - \bar{X}^*)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i^* - \bar{X}^*)^2}} - 1 \right)^2 + \left( \frac{\bar{X}^* \sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}}{\bar{X} \sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i^* - \bar{X}^*)^2}} - 1 \right)^2 + \left( \frac{\bar{X}}{\bar{X}^*} - 1 \right)^2} \quad (11)$$

In this paper, the global adjoint SA is performed to determine the model's most influential parameters completing, thus, the model description presented in (Chelil et al., 2022a). For more details about the theory of the GASA method and its related algorithm description, one can refer to (Goutal et al., 2018; Gejadze et al., 2019; Chelil et al., 2022b).

#### 2.4. Data assimilation (4D-Var)

As described in the section 2.3, the adjoint model is needed to perform variational DA. It can be obtained manually or using a generic automatic differentiation tool such as TAPENDE (Hascoet and Pascual, 2013). The adjoint code allows the precise computation of the cost function gradient (sensitivities) in a single adjoint model run, despite its relatively challenging implementation in some particular cases (e.g. presence of non-differentiable operators).

In this study, the 4D-Var algorithm is implemented to improve the estimation of both the yearly variable  $RNBW = Nit(0)$  and the time variation of the nitrate pool in the soil  $Nit(t)$ . For this purpose, two experimental set-ups have been introduced:

- a. The annual estimations of the RNBW variable ( $Nit(0)$ ) in order to identify the sampling frequency beyond which we lose substantial information on either the quality of the RNBW estimated values or the related nitrate concentration simulations.
- b. The estimation of the model time dependent input variable  $Nit(t)$  (i.e. evolution of the nitrate storage in SSC and FC compartments) which enables the consideration of the spring fertilization applications and biogeochemical interactions.

The optimal estimation of the model inputs is obtained through the minimization of a well-defined cost function, as follows:

$$J(U) = \frac{1}{2} \|(R^{-1/2} M(U) - X^*)\|^2 + \frac{1}{2} \|B^{-1/2} (U - U_b)\|^2 \quad (12)$$

$$B = E(\xi_b \xi_b^T)$$

$$R = E(\xi_o \xi_o^T)$$

$$a \leq U \leq b$$

Where  $B$  and  $R$  are the covariance matrices of the background  $\xi_b$  and the observation  $\xi_o$  errors, respectively. Let us note that this classical formulation of 4D-Var is more adequate when the background information is reliable and informative. In this case, no prior information is available. Therefore, we consider a variant of 4D-Var, based on the iterative

regularization with the following change of variable  $U = U_b + B^{1/2}W$ , as described in (Gejadze and Malaterre, 2017; Oubanas et al., 2018b). The cost function formulation becomes:

$$405 \quad J(U) = \frac{1}{2} \|(R^{-1/2}M(U_b + B^{1/2}W) - X^*)\|^2 \quad (13)$$

The minimization is performed using gradient-based optimization methods. Here, we use a limited memory L-BFGS-B algorithm (Zhu et al., 1997) for constrained minimization. The advantage of considering bounded input values is getting reliable solutions while limiting the occurrence of equifinality issues.

410 The choice of the 4D-Var method is motivated by the need to estimate the time dependent input variable  $Nit(t)$ . Hence, variational method allows for the quick and precise estimation of a high-dimensional control vector by assimilating the available observations of the model output (e.g. nitrate concentrations).

### 2.5. Objective criteria

415 NSE (Nash and Sutcliffe, 1970) and KGE (Gupta et al., 2009) criteria are calculated to assess the quality of the nitrate concentration simulations. NSE (Eq. 14) as well as KGE (Eq. 11) values ranges from  $-\infty$  to 1, which corresponds to the best fit between the observations and the simulations.

$$NSE = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (X_n - X_n^*)^2}{\sum_{i=1}^n (X_n^* - \bar{X}^*)^2} \quad (14)$$

420 In addition, the yearly estimated RNBW and input parameter values providing the “reference” hourly nitrate concentration simulations (Figure 4) are indicated in Chelil et al. (2022a). The quality of these simulations have been evaluated using NSE, KGE and RMSE (Kenney and Keeping, 1962) criteria. In fact, these yearly estimated inputs (RNBW and U) will be used to run the “reference” simulations and are crucial in the evaluation of the impact of the nitrate concentrations sampling frequency (section 2.6).

425

### 2.6. Nitrate concentrations sampling strategy

An experimental set-up is performed in this study to assess the impact of the nitrate concentration sampling frequencies on the RNBW values estimated by means of the 4D-Var algorithm. The purpose is to identify the minimal sampling frequency that is required to achieve a good estimation accuracy of RNBW.

430

In this study, the considered sampling frequencies of the nitrate concentrations range from one value per hour to one value per quarter (Figure 6). Hereinafter, the notation “reference”

refers to the RNBW values estimated considering the nitrate concentrations data at the highest observation frequency (i.e. hourly time step). In all cases, the nitrate concentrations are simulated at the hourly time step.

To each sampling frequency, corresponds a number of simulations ( $n$ ). In other words, we browse all possible cases for each sampling frequency as performed by Birgand et al. (2010). For instance, twenty-four modeling combinations (24 observations) are possible when considering the daily sampling frequency. In this case, each simulation corresponds to nitrate concentration data sampled at a specific hour of the day (e.g., 8 a.m., 1 p.m.).

The sampling strategy is shown in Figure 6. In total, 176 modeling combinations are considered (Table SM 3). The estimation errors are defined as the difference between the estimated and the reference values of RNBW given different sampling frequencies. Hence, only the RNBW values will be estimated. The yearly pre-calibrated NIT-DRAIN parameters ( $U$ ) are derived from the model evaluation study carried out using the *Rampillon* agricultural field data (Chelil et al., 2022a).

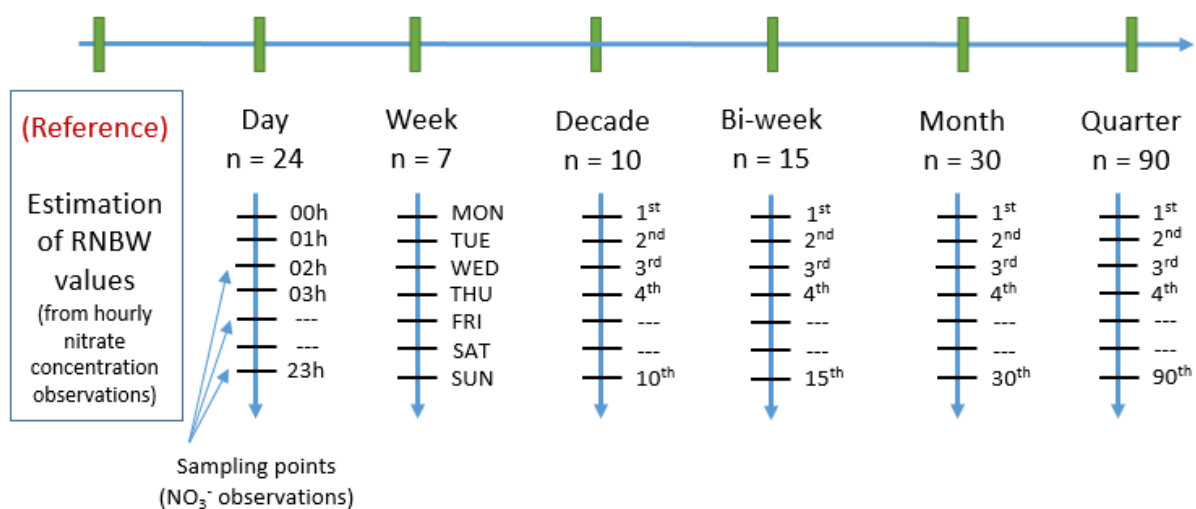


Figure 6: The retained sampling frequencies of the nitrate concentrations to estimate the RNBW values

### 3. Results

#### 3.1. The model parameters impact

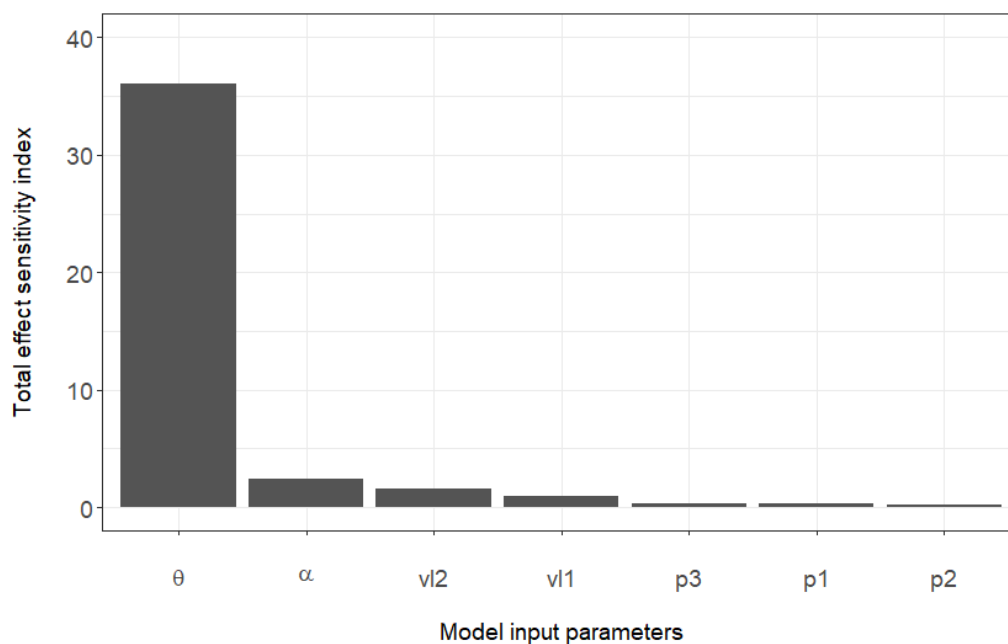
The global adjoint sensitivity analysis was applied to assess the impact of the NIT-DRAIN inputs on the KGE metric (valuable function “ $J$ ”). The ensemble of size  $n = 2000$  was selected to ensure both the stability of the results and low computational time, as indicated above.

455 The bounds  $a$  and  $b$  (Eq. 10) are specified for all NIT-DRAIN parameters  $U$  (Table 3) according to their respective calibrated values in (Chelil et al., 2022a).

Table 3: Minimum ( $a$ ) and maximum ( $b$ ) model parameter values

Model parameters	$\alpha$ (-)	$v_{l1}$ (m.h <sup>-1</sup> )	$v_{l2}$ (m.h <sup>-1</sup> )	$\theta$ (-)	$p_1$ (-)	$p_2$ (-)	$p_3$ (m)
<b>a</b>	0.50	1.10 <sup>-3</sup>	1.10 <sup>-6</sup>	1.10 <sup>-3</sup>	0.1	1.10 <sup>-4</sup>	1.0
<b>b</b>	0.99	1.10 <sup>0</sup>	1.10 <sup>-3</sup>	1.10 <sup>-1</sup>	10.0	1.10 <sup>-2</sup>	1.3

460 Results in Figure 7 show that the highest impact on the model output is to the volumetric water content at field capacity ( $\theta$ ). This parameter could be easily assessed at the field scale and is invariable over time. The volumetric water content at field capacity (generally known by farmers) is useful to manage the crop water demand. The  $\theta$  parameter is included in the Burns transfer function and controls the nitrate exportation from the fast compartment (FC). However, the nitrate concentration simulations show lower sensitivity to the sharing coefficient ( $\alpha$ ) and the nitrate transfer velocities ( $v_{l2}$ ) and ( $v_{l1}$ ).



465

Figure 7: The impact of NIT-DRAIN model parameters on the nitrate concentration output using the KGE metric as the valuable function  $J$

### 3.2. The variational data assimilation plus-value

470 In this section, VDA is used to estimate (1) the RNBW variable with different sampling frequencies of nitrate concentration, and (2) the evolution of the nitrate storage as well as RNBW given the model pre-calibrated inputs and known forcing.

### 3.2.1. The effect of the $\text{NO}_3^-$ sampling frequency on the RNBW estimations

This modeling experiment seeks to identify both the RNBW relative errors corresponding to the model simulations carried out for each nitrate concentration sampling frequency and their corresponding NSE values.

First, the results were obtained based on annual RNBW estimations (see supplemental material; Figure SM 1 and Figure SM 2). Then, both RNBW relative errors and NSE values were combined to get a general overview of the sampling frequency effect over the entire period of study (i.e., 2014-2020). The total number of simulations ( $n$  values) for each considered sampling frequency are featured in the x-axis of Figure 8 and Figure 9.

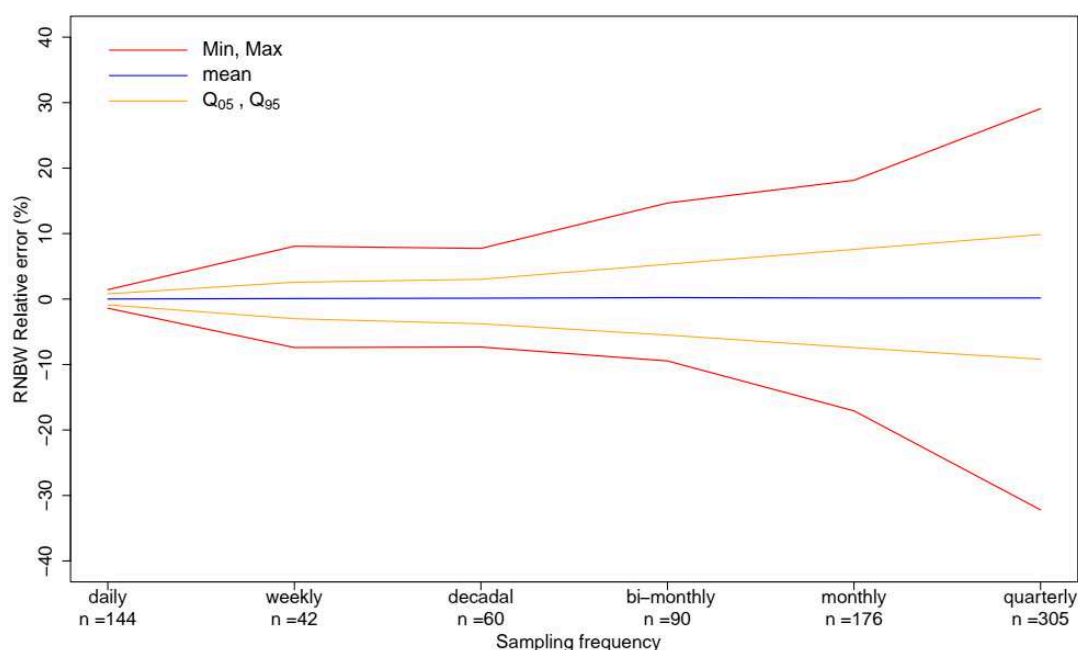
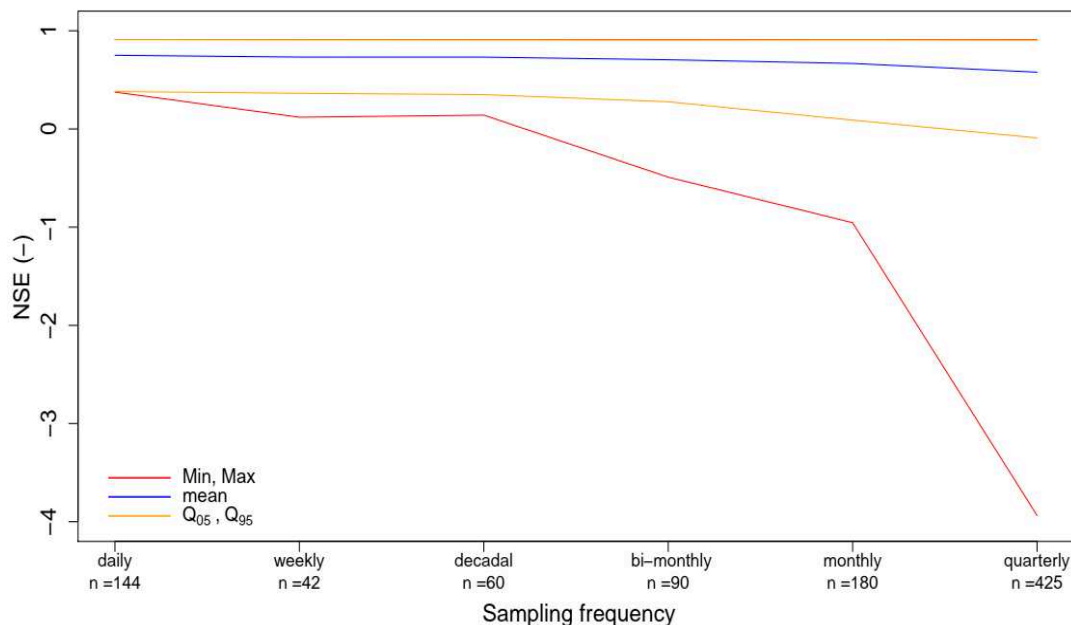


Figure 8: The mean RNBW relative estimation errors as function of the different sampling frequencies; red lines correspond to the minimum and maximum possible RNBW errors; the blue line describe the average values obtained for each sampling frequency;  $Q_{05}$  and  $Q_{95}$  are the quantiles 5% and 95%, respectively

According to Figure 8 and Table SM 1 statistics, the decadal sampling of the nitrate concentrations at the outlet of the *Rampillon* agricultural subsurface drained catchment leads to less than 8% ( $\pm 5.5 \text{ KgN.ha}^{-1}.\text{year}^{-1}$ ) of RNBW relative error based on an average reference RNBW value of  $69.3 \text{ kgN.ha}^{-1}.\text{year}^{-1}$ . In addition, decadal sampling frequency is required to avoid negative values of NSE (Figure 8 and Table SM 2). One can notice the stability of the mean RNBW error and NSE values (blue lines) for all sampling frequencies. Their values remain around 0% and 0.7 for RNBW and NSE, respectively. However, the RNBW estimation uncertainty can exceed  $\pm 10\%$ , reaching  $\pm 30\%$  ( $\pm 21 \text{ KgN.ha}^{-1}.\text{year}^{-1}$ ) in the case of quarterly nitrate concentration sampling.



495 *Figure 9: NSE values resulting from the RNBW estimation for each sampling frequency; red lines correspond to the minimum and maximum possible value of NSE; the blue line outlines the average values of NSE relatives to each sampling class;  $Q_{05}$  and  $Q_{95}$  are the quantiles 5% and 95%, respectively*

### 3.2.2. The temporal estimation of the nitrate soil storage

Estimating the temporal evolution of the nitrate storage in the soil  $Nit(t)$  using the 4D-Var  
 500 approach improves significantly the nitrate concentration simulations, outside the winter season in particular. The nitrate storage dynamics during the six hydrological seasons depicted in Figure 10 correspond to the sum of the nitrate quantity stored inside the fast (FC) and the slow (SSC) superficial compartments. These nitrate storage variations are obtained either starting from an initial RNBW estimation (darkred color) or by estimating the hourly  
 505 nitrate soil storage over each hydrological year (dark color; Figure 10).

Indeed, a large part of the information embedded in the nitrate concentration as well as flux observations, during the spring season, has been captured when estimating hourly nitrate storage variations in comparison with the case of yearly RNBW estimations (Table 4, Figure 10). This modeling improvement during the spring season has been quantified using NSE and  
 510 KGE criteria. Their values (close to one) indicate an almost perfect simulation case. In contrast, one can observe much smaller or even negative values of NSE/KGE for the 2015-2016 hydrological year when relying on yearly RNBW estimation. This result is mainly due to the incorrect simulation of the nitrate concentrations during the spring season (Figure 4B). At this specific period, the low quality of nitrate concentration simulations may be attributed  
 515 to disregarding biogeochemical interactions and exacerbated by the potential occurrence of major flood events, responsible for high nitrate-flushing episodes such as the one observed during May 2016.

Table 4: Objective comparison of the model performances (i.e. quality of nitrate concentration simulations) using the two 4D-VAR experimental setups

Experimental setup	Model performances (nitrate concentrations)					
	Yearly RNBW estimation				Temporal nitrate storage estimation	
	Winter season (September-February)		Entire hydrological year (September-August)		Entire hydrological year (September-August)	
Simulation period						
Criteria	NSE	KGE	NSE	KGE	NSE	KGE
2014-2015	0.74	0.84	0.60	0.80	1.00	0.99
2015-2016	0.91	0.95	-0.77	0.29	0.84	0.90
2016-2017	0.82	0.88	-0.16	0.38	0.99	0.98
2017-2018	0.83	0.86	0.64	0.81	0.99	0.99
2018-2019	0.52	0.45	-0.19	0.48	0.93	0.88
2019-2020	0.82	0.90	0.72	0.86	0.9	0.91

520 The results illustrate a good simulation of nitrate concentrations during the winter season when using an annual RNBW estimation (Figure 4, Table 4). However, the quality of simulations decrease significantly when we consider the entire hydrological year data. In fact, the estimation of the initial nitrate storage value (RNBW) at the beginning of the winter season can be considered sufficient when we focus on the simulation window extending from  
525 September to February. Therefore, one may highlight the effect of biogeochemical processes and fertilization (generally occurring during the spring season) by considering the hourly nitrate storage estimation using VDA, over the entire hydrological year.

Figure 10 gathers the hourly nitrate storage variations (top part) as well as the corresponding nitrate flux simulations (bottom part). In addition to the high quality of nitrate flux  
530 simulations, the temporal nitrate storage estimations involving the entire hydrological year allows for a first approximation of the quantity of nitrate updated during the spring season. Fast nitrate storage update is observed during the month of May of each hydrological year. The updated quantity of nitrate varies from 80 KgN/ha (2015-2016) to 300 KgN/ha (2016-2017), depending on the climate (e.g., rainfall, temperatures), agricultural practices, and the  
535 crop rotation in place. These nitrate updates are supposed to be composed of the sum of the nitrate accumulation in the upper soil layers during the spring season (e.g., fertilization, mineralization). Hence, the quantity of nitrate absorbed by the crop (N uptake) could be first estimated by withdrawing nitrate exportation occurring during the spring period (Table 1) from the total nitrate update. For instance, N uptake is supposed equal to 105 KgN/ha during  
540 the 2018 spring season.

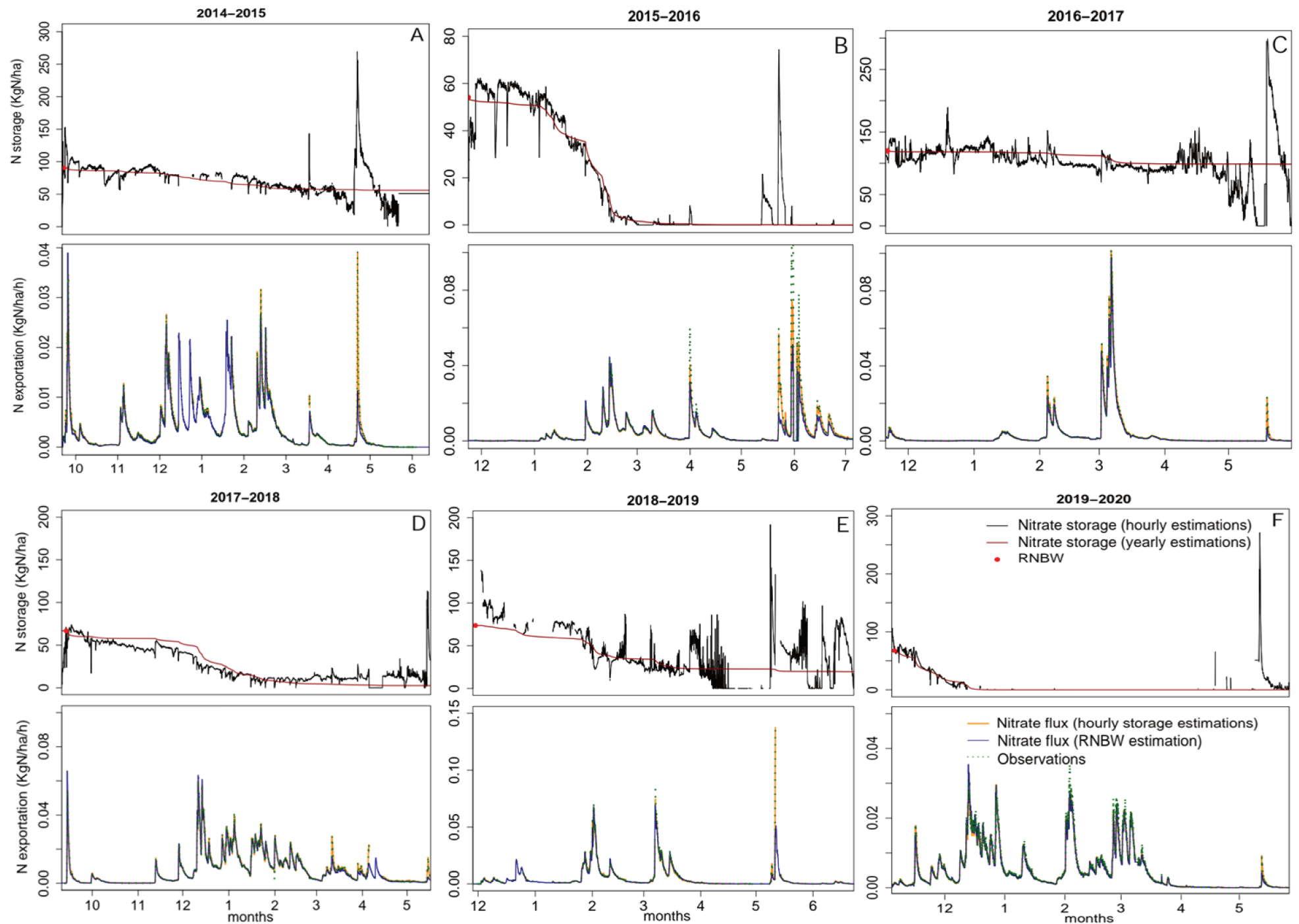


Figure 10: The nitrate storage evolution over the six hydrological years using 4D-Var approach. On the top of each hydrological season, are shown the nitrate storage variations generated using both, annual RNBW estimations (darkred line) and the sum of the hourly estimations of the nitrate quantity in the superficial FC and SSC compartments (black line). On the bottom is plotted the observed nitrate flux, simulated based on hourly nitrate storage estimations (orange line), and simulated based on the yearly RNBW estimations (darkblue line)



## 4. Discussion

In this paper, we assess the ability of the recently developed nitrate model (NIT-DRAIN) to predict the evolution of the nitrate storage through the superficial soil layers of a subsurface drained agricultural catchment. First, the global adjoint sensitivity analysis has been implemented to evaluate the influence of the model inputs on the quality of the nitrate concentration simulations. Then, a modeling experiment has been conducted to explore the estimation uncertainty in the RNBW variable using different sampling frequency of nitrate concentrations. In addition, the variational assimilation (4D-Var) of the nitrate concentration observations has been employed to improve the quality of both the RNBW and the continuous evolution of nitrate storage estimations.

### 4.1. Contribution of the sensitivity analysis

The global adjoint sensitivity analysis indicated that the parameter  $\theta$  presents the highest impact on the quality of the nitrate concentrations. This parameter describes the volumetric water content at the field capacity and manages the water and nitrate flushing from the fast compartment. In fact, both parameters  $\theta$  and  $p_3$  are responsible of the fast nitrate transfers occurring at the beginning of the winter season through the superficial soil macropores (Jacobsen and Kjær, 2007; Frey et al., 2016). According to the study involving the inter-annual calibration of the NIT-DRAIN model parameters (Chelil et al., 2022a), the parameter  $\theta$  presents a high coefficient of variation (CV = 96.1 %) in comparison with the  $p_3$  parameter (CV = 4.3 %). Hence, special attention must be considered before assigning  $\theta$  values due to its considerable variability as model parameter and its significant impact on the model output. Such a parameter could be easily measured at the field scale using appropriate equipment or estimated through the consideration of the soil texture (Al Majou et al., 2008).

### 4.2. The nitrate concentration sampling frequency

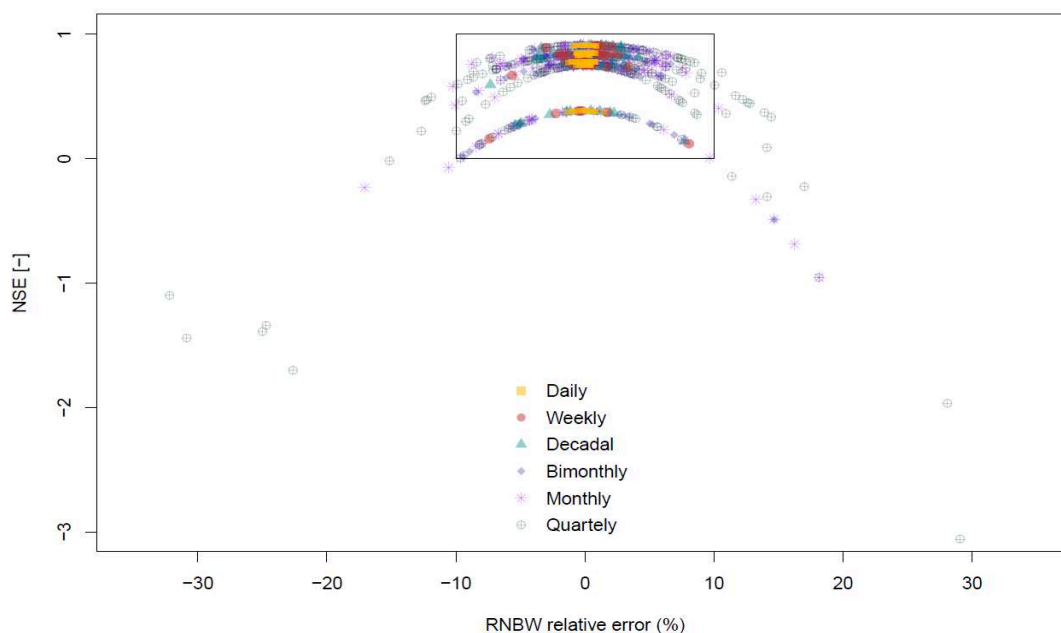
At the agricultural field scale, the drainage network takes the role of a lysimeter which facilitates the access to the nitrate exportation data by measuring the nitrate concentrations at the outlet of the total drained sub catchment (Arlot, 1999). Hence, the choice of the appropriate nitrate concentration sampling frequency is important and depends on the study purpose. One can note the significantly increasing interest of the scientific community for the high nutrient concentrations sampling frequency in the last 30 years (Blaen et al., 2016). Such a frequency acquisition is required to assess the C-Q hysteresis at event-scales (Liu et al., 2020; Tunqui Neira et al., 2020; Liu et al., 2021). In addition, high-sampling frequencies of nitrate concentrations allow for better biogeochemical

processes and flux exportation analysis (Burns et al., 2019). Thus, such a refined analysis may be useful to apply the nitrate regulation directives (Directive, 1991) and ensure the control of the BMP's at local and regional scales.

580 The recent emergence of new technologies has enabled adaptive monitoring of nutrient concentrations. For instance, only marked nutrient dynamics could be captured using high sampling frequency, while small and flat variability signals are registered using medium and low sampling frequencies, respectively (Blaen et al., 2016). Independently of the absolute need for high sampling frequencies, Piniewski et al. (2019) indicated that flow-proportional samples of nitrate flux provide a slight plus in terms simulation quality in comparison with  
585 the regular sampling strategy. On the opposite, Dialameh and Ghane (2022) demonstrated that the drainage flow-proportional sampling strategy ensures the best agreement between the sampling cost and the relative error of phosphorus load (< 7.2 %).

In this study, we investigate if there is a need for continuous and high frequency nitrate concentration observations to estimate accurate values of the remaining nitrate pool at the  
590 beginning of the winter season (RNBW). Our results show that monthly sampling frequency can generate up to 18 % of RNBW relative error while the decadal sampling frequency of nitrate concentrations ensures a reasonable RNBW estimation uncertainty (Figure 11). In that case, less than 8% of RNBW relative errors have been computed provided the availability of one nitrate concentration data per decade, pre-calibrated NIT-DRAIN model parameters, and  
595 a series of hourly discharge observations. Figure 11 shows the relation between the NSE values and the RNBW relative error for each sampling frequency of nitrate concentration. For instance, monthly sampling frequency should be preconized if no more than 10% of RNBW error and positive values of NSE (frame borders) are required.

A comparable order of nitrate flux uncertainty was obtained by Ferrant et al. (2013) using the  
600 decadal sampling frequency of nitrate concentrations. In addition, Birgand et al. (2010) have evaluated the impact of an ensemble of sampling frequencies (from 12 hours to 60 days) on several annual nitrate concentration indicators (e.g., average, maximum). Based on the yearly average values of nitrate concentrations, it has been shown that a maximum of 6% error corresponds to the 14-day sampling frequency. These reported uncertainty values are  
605 consistent with those obtained in this study, confirming our results' reliability. The method introduced in this paper could be used by water agencies, for instance, to adapt their sampling frequency of nitrate concentrations depending on the targeted RNBW estimation uncertainty.



610 *Figure 11: Plot of NSE values as function of RNBW relative errors resulting from the sampling frequency study. The sampling frequencies are gathered by color.*

It may be worthwhile to replicate our sampling methodology using discharge simulations instead of observations as NIT-DRAIN input. Such an experiment may assess the RNBW errors by combining two sources of uncertainty: (1) the discharge simulation uncertainty and  
 615 (2) the effect of nitrate concentration sampling frequency. Moreover, Birgand et al. (2010) recommended that data from several agricultural catchment sizes and hydrological seasons should be included to provide additional information on the uncertainty spatial and temporal variabilities.

#### 4.3. Continuous estimation of the nitrate soil storage using 4D-Var

620 It has been shown in Chelil et al. (2022a) that a single nitrate storage estimation at the beginning of the winter season (i.e., RNBW) is sufficient to efficiently approximate the evolution of the superficial nitrate stock during the winter season, but not after the end of February (Table 4). However, the variational assimilation of the nitrate concentrations allows for the continuous estimation of the nitrate storage dynamics over the upper soil layers and  
 625 during the full hydrological year. In practice, hourly estimation of the nitrate storage dynamics may be useful to catch the spring fertilization information and some marked biogeochemical processes. These combinations of nitrate processes are estimated by the VDA during May of each hydrological season. The latter vary between 120 and 300 KgN/ha, and include the actual mean mineral fertilizer applications during the same period. Hence, the

630 estimation of nitrate storage update during the spring and summer seasons is possible,  
provided the availability of high-frequency nitrate concentration observations. Given the  
availability of nitrate fertilization data, an approximation of the N uptake could be obtained  
assuming the knowledge of the main biogeochemical interactions occurring during the same  
635 period (e.g., mineralization, denitrification, and fixation). It should be noted that the seasonal  
nature of the agricultural subsurface drainage discharge limits the estimation of the nitrate  
storage variations to the periods during which the water flow is observed.

A possible extension of this sub-section may include the effect of the nitrate concentrations  
sampling frequency on the quality of the hourly nitrate storage estimations during the spring  
season. To do so, nitrate storage indicators should be defined as the ones established by  
640 Birgand et al. (2010) on the nitrate concentration series (e.g., Mean or Maximum annual  
values). Note that a similar experiment has been suggested by Oubanas et al. (2018b) to  
assess the influence of the synthetic SWOT sampling intervals on the upstream river  
discharge estimations using a full Saint-Venant hydraulic model.

## 5. Conclusion

645 In this paper, we assess the new conceptual NIT-DRAIN model prediction capacities  
involving the variational data assimilation method for estimating one of its inputs. High-  
frequency drainage discharge and nitrate concentrations data have been recorded at the outlet  
of *Rampillon* subsurface drained agricultural catchment, totaling 355 ha. Hence, six years  
(2014-2020) of hourly observations have been considered in this study, presenting contrasted  
650 hydrological and water quality patterns.

The adjoint code of NIT-DRAIN has been generated through the automatic differentiation  
tool (TAPENADE). This code allows for global adjoint SA and variational data assimilation  
applications. Hence, the most influencing model parameter on the quality of the nitrate  
concentration simulations is the  $\theta$  soil parameter, which is responsible for the nitrate transfer  
655 velocity from the fast model compartment. In addition, the 4D-Var approach has been  
successfully implemented to estimate the nitrate storage variations and RNBW values under  
different sampling frequencies.

A decadal sampling of nitrate concentrations should be set up to ensure less than 8% of  
RNBW estimation uncertainty and correct nitrate concentration simulations. However, given  
660 the low sampling frequency campaigns available at the field scale, we may be constrained to  
consider the monthly nitrate concentration frequency which still generates less than 18% of

RNBW relative error. Furthermore, we have confirmed that estimating a single value of nitrate storage at the beginning of the winter season (i.e., RNBW) is enough to achieve correct nitrate dynamics and nitrate concentration simulations during the winter season (from  
665 September to February).

Finally, we have demonstrated the advantage of using variational data assimilation to estimate the unknown hourly nitrate storage dynamics during the spring season. Encouraging nitrate storage estimations have been achieved at this specific period of the year. Indeed, the fast nitrate storage update of the two superficial compartments during the spring season (April-  
670 May) may be comparable with the actual average fertilizers spread over the same agricultural area. In addition, a first approximation of the N uptake may be calculated given the knowledge of the estimated nitrate storage values (ensured using VDA) and the nitrate exportation occurring during the spring period (February-May).

## Supplemental material

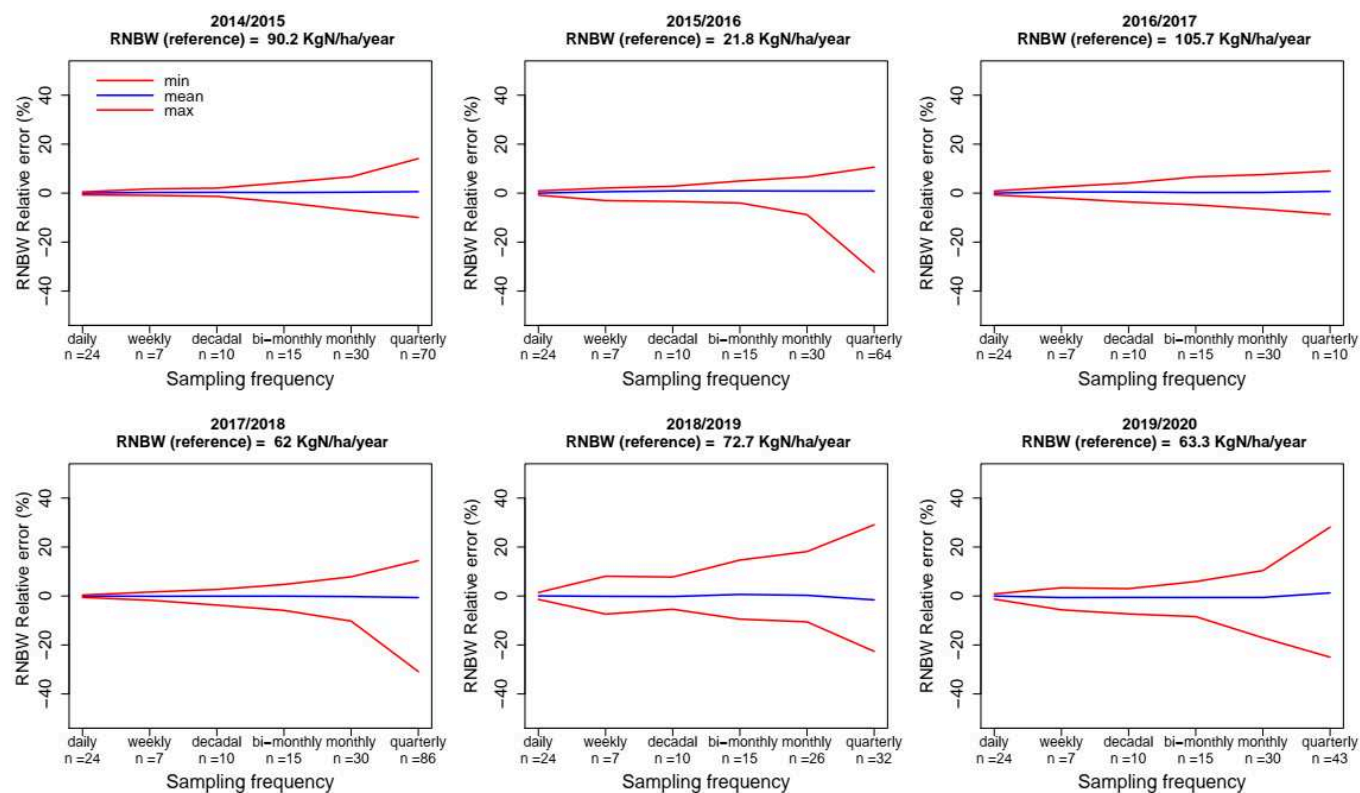


Figure SM 1: The RNBW relative errors as function of each sampling frequency of nitrate concentration observations

*Table SM 1: Basic Statistics of RNBW values for (1) each hydrological year and (2) all years combined function of the considered nitrate concentration sampling frequencies*

hydrological season	index	daily	weekly	decadal	bi-monthly	monthly	quarterly
2014-2015	Minimum	-1.3	-5.6	-7.3	-8.4	-17.1	-25
	Mean	0	-0.6	-0.6	-0.6	-0.6	1.3
	Maximum	0.8	3.4	3	5.9	10.4	28.1
2015-2016	Minimum	-1.4	-7.4	-5.4	-9.5	-10.6	-22.6
	Mean	0	-0.1	-0.2	0.6	0.3	-1.6
	Maximum	1.4	8.1	7.7	14.7	18.1	29.1
2016-2017	Minimum	-0.6	-1.7	-3.7	-5.9	-10.3	-30.9
	Mean	0	-0.1	-0.1	-0.1	-0.2	-0.6
	Maximum	0.4	1.6	2.7	4.7	7.8	14.4
2017-2018	Minimum	-0.7	-2	-3.6	-4.8	-6.6	-8.7
	Mean	0	0.5	0.5	0.2	0.3	0.7
	Maximum	0.8	2.6	4.1	6.6	7.6	9
2018-2019	Minimum	-0.8	-3	-3.4	-4	-8.8	-32.2
	Mean	0	0.6	0.9	0.9	0.9	0.8
	Maximum	0.9	2.1	2.8	5	6.7	10.6
2019-2020	Minimum	-0.7	-0.9	-1.3	-3.8	-7	-10
	Mean	0	0.3	0.3	0.3	0.4	0.6
	Maximum	0.5	1.7	2	4.3	6.7	14.1
2014-2020	Minimum	-1.4	-7.4	-7.3	-9.5	-17.1	-32.2
	Mean	0.0	0.1	0.1	0.2	0.2	0.2
	Maximum	1.4	8.1	7.7	14.7	18.1	29.1
	Quantile 5%	-0.9	-3.0	-3.8	-5.5	-7.4	-9.2
	Quantile 95%	0.8	2.6	3.0	5.3	7.6	9.8

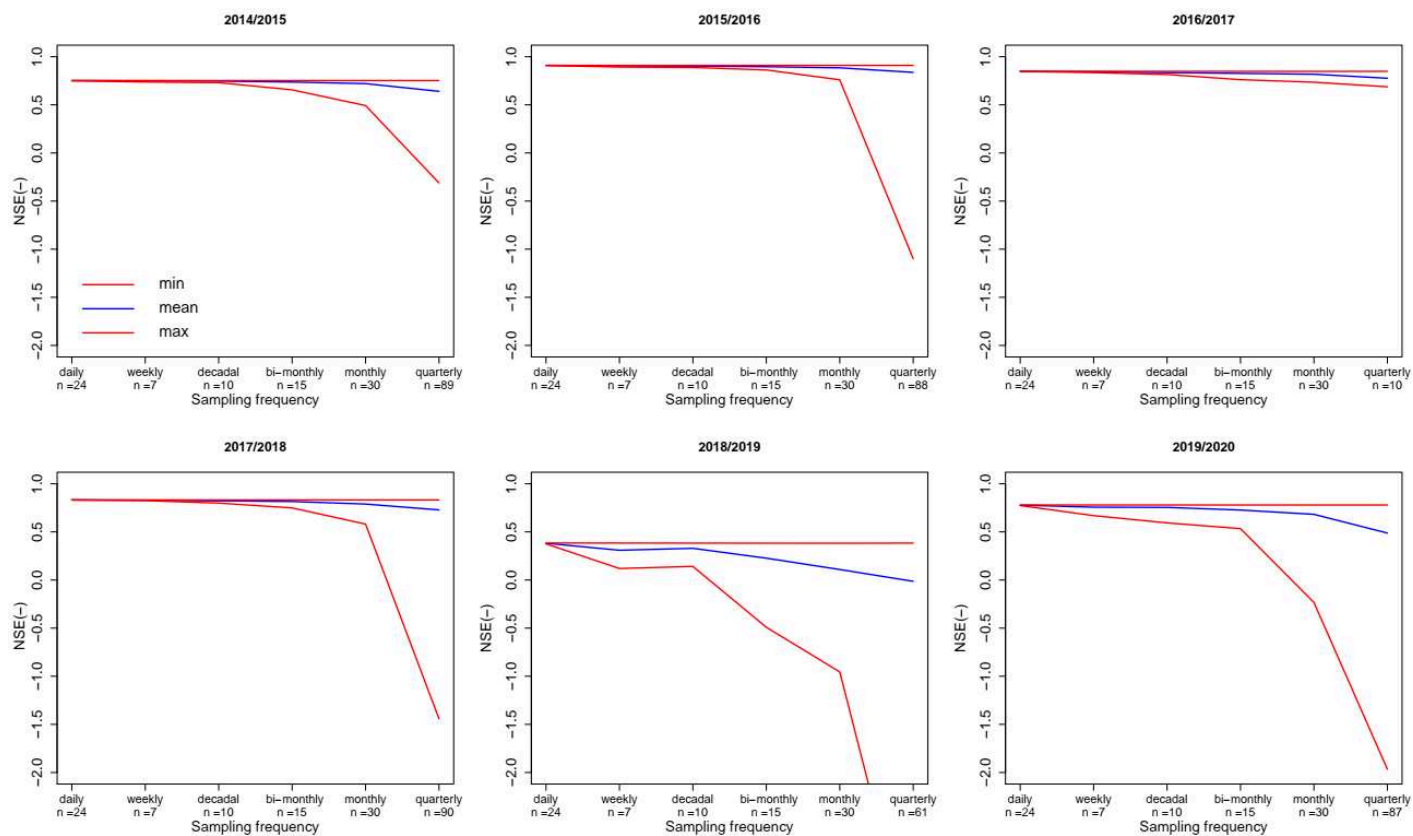


Figure SM 2: NSE as function of each sampling frequency of nitrate concentration observations





*Table SM 3: The retained sampling frequencies of the nitrate concentrations to estimate the RNBW values*

Sampling frequency	details	Sample size (n)
1 hour (reference)	The estimation of the RNBW reference value	-
1 day	One observation per day (from 12 a.m. to 12 p.m.)	24
7 days	One observation per week (from Saturday to Friday)	7
10 days	Three observations per month	10
15 days	Two observations per month	15
1 month	One observation per month	30
3 months	Four observations per year	90

## References

- Al Majou, H., Bruand, A., and Duval, O. (2008). The use of in situ volumetric water content at field capacity to improve the prediction of soil water retention properties. *Canadian Journal of Soil Science* **88**, 533-541.
- 5 Allaire, G. (2015). A review of adjoint methods for sensitivity analysis, uncertainty quantification and optimization in numerical codes.
- Arlot, M.-P. (1999). Nitrates dans les eaux : Drainage acteur, drainage témoin ? Les enseignements d'une approche hydrologique et hydraulique sur (1) l'influence du drainage agricole sur la contamination diffuse des eaux par les nitrates et (2) sur les
- 10 possibilités d'utiliser les parcelles drainées pour l'analyse de la dite contamination.
- Arsenault, R., Poulin, A., Côté, P., and Brissette, F. (2014). Comparison of stochastic optimization algorithms in hydrological model calibration. *Journal of Hydrologic Engineering* **19**, 1374-1384.
- Birgand, F., Appelboom, T., Chescheir, G., and Skaggs, R. (2011). Estimating nitrogen, phosphorus, and carbon fluxes in forested and mixed-use watersheds of the lower coastal plain of North Carolina: Uncertainties associated with infrequent sampling. *Transactions of the ASABE* **54**, 2099-2110.
- 15 Birgand, F., Faucheux, C., Gruau, G., Augeard, B., Moatar, F., and Bordenave, P. (2010). Uncertainties in assessing annual nitrate loads and concentration indicators: Part 1. Impact of sampling frequency and load estimation algorithms. *Transactions of the ASABE* **53**, 437-446.
- 20 Blaen, P. J., Khamis, K., Lloyd, C. E. M., Bradley, C., Hannah, D., and Krause, S. (2016). Real-time monitoring of nutrients and dissolved organic matter in rivers: Capturing event dynamics, technological opportunities and future directions. *Science of The Total Environment* **569-570**, 647-660.
- 25 Branger, F., Tournebize, J., Carluer, N., Kao, C., Braud, I., and Vauclin, M. (2009). A simplified modelling approach for pesticide transport in a tile-drained field: The PESTDRAIN model. *Agricultural Water Management* **96**, 415-428.
- Brisson, N., Gary, C., Justes, E., Roche, R., Mary, B., Ripoche, D., Zimmer, D., Sierra, J., Bertuzzi, P., and Burger, P. (2003). An overview of the crop model STICS. *European Journal of agronomy* **18**, 309-332.
- 30 Burns, D. A., Pellerin, B. A., Miller, M. P., Capel, P. D., Tesoriero, A. J., and Duncan, J. M. (2019). Monitoring the riverine pulse: Applying high-frequency nitrate data to advance integrative understanding of biogeochemical and hydrological processes. *WIREs Water* **6**, e1348.
- 35 Burns, I. G. (1975). An equation to predict the leaching of surface-applied nitrate. *The Journal of Agricultural Science* **85**, 443-454.
- Burns, I. G. (1976). Equations to predict the leaching of nitrate uniformly incorporated to a known depth or uniformly distributed throughout a soil profile. *The Journal of Agricultural Science* **86**, 305-313.
- 40 Cacuci, D. (1981). Sensitivity Theory for Nonlinear Systems. I. Nonlinear Functional Analysis Approach. *Journal of Mathematical Physics* **22**, 2794-2802.
- Chelil, S., Henine, H., Chaumont, C., and Tournebize, J. (2022a). NIT-DRAIN model to simulate nitrate concentrations and leaching in a tile-drained agricultural field. *Agricultural Water Management* **271**, 107798.
- 45 Chelil, S., Oubanas, H., Henine, H., Gejadze, I., Olivier Malaterre, P., and Tournebize, J. (2022b). Variational Data Assimilation to Improve Subsurface Drainage Model Parameters. *Journal of Hydrology*, 128006.

- Chen, J., Huang, Y., and Caldwell, R. D. (2001). Best Management Practices for Minimizing Nitrate Leaching from Container-Grown Nurseries. *TheScientificWorldJOURNAL* **1**, 102320.
- 5 Cho, K. H., Pachepsky, Y., Ligaray, M., Kwon, Y., and Kim, K. H. (2020). Data assimilation in surface water quality modeling: A review. *Water Research* **186**, 116307.
- Christopher Frey, H., and Patil, S. R. (2002). Identification and review of sensitivity analysis methods. *Risk analysis* **22**, 553-578.
- Craswell, E. (2021). Fertilizers and nitrate pollution of surface and ground water: an increasingly pervasive global problem. *SN Applied Sciences* **3**, 1-24.
- 10 de Paz, J. M., and Ramos, C. (2004). Simulation of nitrate leaching for different nitrogen fertilization rates in a region of Valencia (Spain) using a GIS–GLEAMS system. *Agriculture, Ecosystems & Environment* **103**, 59-73.
- Di, H., and Cameron, K. (2002). Nitrate leaching in temperate agroecosystems: sources, factors and mitigating strategies. *Nutrient cycling in agroecosystems* **64**, 237-256.
- 15 Dialameh, B., and Ghane, E. (2022). Effect of water sampling strategies on the uncertainty of phosphorus load estimation in subsurface drainage discharge. *Journal of Environmental Quality* **51**, 377-388.
- Directive, C. (1991). Concerning the protection of waters against pollution caused by nitrates from agricultural sources. *Official Journal* **375**.
- 20 Duan, S., Powell, R. T., and Bianchi, T. S. (2014). High frequency measurement of nitrate concentration in the Lower Mississippi River, USA. *Journal of Hydrology* **519**, 376-386.
- Dupas, R., Curie, F., Gascuel-Oudou, C., Moatar, F., Delmas, M., Parnaudeau, V., and Durand, P. (2013). Assessing N emissions in surface water at the national level: comparison of country-wide vs. regionalized models. *The Science of the total environment* **443**, 152-62.
- 25 Dupas, R., Delmas, M., Dorioz, J.-M., Garnier, J., Moatar, F., and Gascuel-Oudou, C. (2015). Assessing the impact of agricultural pressures on N and P loads and eutrophication risk. *Ecological Indicators* **48**, 396-407.
- 30 Ferrant, S., Laplanche, C., Durbe, G., Probst, A., Dugast, P., Durand, P., Sanchez-Perez, J.-M., and Probst, J.-L. (2013). Continuous measurement of nitrate concentration in a highly event-responsive agricultural catchment in south-west of France: Is the gain of information useful? *Hydrological Processes* **27**, 1751-1763.
- Frey, S. K., Hwang, H.-T., Park, Y.-J., Hussain, S. I., Gottschall, N., Edwards, M., and Lapen, D. R. (2016). Dual permeability modeling of tile drain management influences on hydrologic and nutrient transport characteristics in macroporous soil. *Journal of Hydrology* **535**, 392-406.
- 35 Gan, Y., Duan, Q., Gong, W., Tong, C., Sun, Y., Chu, W., Ye, A., Miao, C., and Di, Z. (2014). A comprehensive evaluation of various sensitivity analysis methods: A case study with a hydrological model. *Environmental Modelling & Software* **51**, 269-285.
- 40 Gejadze, I., and Malaterre, P.-O. (2017). Discharge estimation under uncertainty using variational methods with application to the full Saint-Venant hydraulic network model. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **83**, 405-430.
- Gejadze, I., Malaterre, P. O., and Shutyaev, V. (2019). On the use of derivatives in the polynomial chaos based global sensitivity and uncertainty analysis applied to the distributed parameter models. *Journal of Computational Physics* **381**, 218-245.
- 45 Gerke, H. H., and Maximilian Köhne, J. (2004). Dual-permeability modeling of preferential bromide leaching from a tile-drained glacial till agricultural field. *Journal of Hydrology* **289**, 239-257.

- Ghorbanidehno, H., Kokkinaki, A., Lee, J., and Darve, E. (2020). Recent developments in fast and scalable inverse modeling and data assimilation methods in hydrology. *Journal of Hydrology* **591**, 125266.
- 5 Golmohammadi, G., Rudra, R. P., Parkin, G. W., Kulasekera, P. B., Macrae, M., and Goel, P. K. (2021). Assessment of Impacts of Climate Change on Tile Discharge and Nitrogen Yield Using the DRAINMOD Model. *Hydrology* **8**, 1.
- Goutal, N., Goeury, C., Ata, R., Ricci, S., Nabil, E. M., Rochoux, M., Oubanas, H., Gejadze, I., and Malaterre, P.-O. (2018). Uncertainty Quantification for River Flow Simulation Applied to a Real Test Case: The Garonne Valley. pp. 169-187.
- 10 Gupta, H. V., Kling, H., Yilmaz, K. K., and Martinez, G. F. (2009). Decomposition of the mean squared error and NSE performance criteria: Implications for improving hydrological modelling. *Journal of Hydrology* **377**, 80-91.
- Gupta, H. V., Sorooshian, S., and Yapo, P. O. (1999). Status of Automatic Calibration for Hydrologic Models: Comparison with Multilevel Expert Calibration. *Journal of Hydrologic Engineering* **4**, 135-143.
- 15 Haas, M. B., Guse, B., and Fohrer, N. (2017). Assessing the impacts of Best Management Practices on nitrate pollution in an agricultural dominated lowland catchment considering environmental protection versus economic development. *Journal of Environmental Management* **196**, 347-364.
- 20 Hascoet, L., and Pascual, V. (2013). The Tapenade Automatic Differentiation tool: principles, model, and specification. *ACM Transactions on Mathematical Software* **39**.
- Henine, H., Jeantet, A., Chaumont, C., Chelil, S., Lauvernet, C., and Tournebize, J. (2022). Coupling of a subsurface drainage model with a soil reservoir model to simulate drainage discharge and drain flow start. *Agricultural Water Management* **262**, 107318.
- 25 Huang, T., Ju, X., and Yang, H. (2017). Nitrate leaching in a winter wheat-summer maize rotation on a calcareous soil as affected by nitrogen and straw management. *Scientific Reports* **7**, 42247.
- Jacobsen, O. H., and Kjær, J. (2007). Is tile drainage water representative of root zone leaching of pesticides? *Pest Management Science: formerly Pesticide Science* **63**, 417-428.
- 30 Jay-Allemand, M., Javelle, P., Gejadze, I., Arnaud, P., Malaterre, P. O., Fine, J. A., and Organde, D. (2020). On the potential of variational calibration for a fully distributed hydrological model: application on a Mediterranean catchment. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* **24**, 5519-5538.
- 35 Jeantet, A., Henine, H., Chaumont, C., Collet, L., Thirel, G., and Tournebize, J. (2021). Robustness of a parsimonious subsurface drainage model at the French national scale. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* **25**, 5447-5471.
- Jiang, Q., Qi, Z., Xue, L., Bukovsky, M., Madramootoo, C. A., and Smith, W. (2020). Assessing climate change impacts on greenhouse gas emissions, N losses in drainage and crop production in a subsurface drained field. *Science of The Total Environment* **705**, 135969.
- 40 Jury, W. A., and Roth, K. (1990). "Transfer functions and solute movement through soil: theory and applications," Birkhäuser Verlag AG.
- Kenney, J. F., and Keeping, E. (1962). Root mean square. *Mathematics of statistics, Pt 1*, 59-60.
- 45 Kladvivko, E. J., Van Scoyoc, G. E., Monke, E. J., Oates, K. M., and Pask, W. (1991). Pesticide and Nutrient Movement into Subsurface Tile Drains on a Silt Loam Soil in Indiana. *Journal of Environmental Quality* **20**, 264-270.
- Lebrun, J. D., Ayrault, S., Drouet, A., Bordier, L., Fechner, L. C., Uher, E., Chaumont, C., and Tournebize, J. (2019). Ecodynamics and bioavailability of metal contaminants in a
- 50

- constructed wetland within an agricultural drained catchment. *Ecological Engineering* **136**, 108-117.
- 5 Liu, W., Birgand, F., Tian, S., and Chen, C. (2021). Event-scale hysteresis metrics to reveal processes and mechanisms controlling constituent export from watersheds: A review☆. *Water Research* **200**, 117254.
- Liu, W., Youssef, M. A., Birgand, F. P., Chescheir, G. M., Tian, S., and Maxwell, B. M. (2020). Processes and mechanisms controlling nitrate dynamics in an artificially drained field: Insights from high-frequency water quality measurements. *Agricultural Water Management* **232**, 106032.
- 10 Liu, Y., Li, S., Wallace, C. W., Chaubey, I., Flanagan, D. C., Theller, L. O., and Engel, B. A. (2017). Comparison of Computer Models for Estimating Hydrology and Water Quality in an Agricultural Watershed. *Water Resources Management* **31**, 3641-3665.
- Ma, L., R. Ahuja, L., T. Nolan, B., W. Malone, R., J. Trout, T., and Qi, Z. (2012). Root Zone Water Quality Model (RZWQM2): Model Use, Calibration, and Validation. *Transactions of the ASABE* **55**, 1425-1446.
- 15 Magesan, G., Scotter, D., and White, R. (1994). A transfer function approach to modeling the leaching of solutes to subsurface drains .I. Nonreactive solutes. *Soil Research* **32**, 69-83.
- Mander, Ü., Tournebize, J., Espenberg, M., Chaumont, C., Torga, R., Garnier, J., Muhel, M., Maddison, M., Lebrun, J. D., Uher, E., Remm, K., Pärn, J., and Soosaar, K. (2021). High denitrification potential but low nitrous oxide emission in a constructed wetland treating nitrate-polluted agricultural run-off. *Science of The Total Environment* **779**, 146614.
- 20 Moriasi, D., Gitau, M., Pai, N., and Daggupati, P. (2015). Hydrologic and Water Quality Models: Performance Measures and Evaluation Criteria. *Transactions of the ASABE (American Society of Agricultural and Biological Engineers)* **58**, 1763-1785.
- Moriasi, D., Wilson, B., Douglas-Mankin, K., Arnold, J., and Gowda, P. (2012). Hydrologic and water quality models: Use, calibration, and validation. *Transactions of the ASABE* **55**, 1241-1247.
- 30 Muhammed, S. E., Coleman, K., Wu, L., Bell, V. A., Davies, J. A. C., Quinton, J. N., Carnell, E. J., Tomlinson, S. J., Dore, A. J., Dragosits, U., Naden, P. S., Glendining, M. J., Tipping, E., and Whitmore, A. P. (2018). Impact of two centuries of intensive agriculture on soil carbon, nitrogen and phosphorus cycling in the UK. *Science of The Total Environment* **634**, 1486-1504.
- 35 Nash, J. E., and Sutcliffe, J. V. (1970). River flow forecasting through conceptual models part I—A discussion of principles. *Journal of hydrology* **10**, 282-290.
- Nguyen, V. T., Georges, D., Besançon, G., and Zin, I. (2016). Parameter estimation of a real hydrological system using an adjoint method\*\*This work has been partially supported by the LabEx PERSYVAL-Lab (ANR-11-LABX-0025-01) and the MEPIERA project, Grenoble Institute of Technology. *IFAC-PapersOnLine* **49**, 300-305.
- 40 Oubanas, H., Gejadze, I., Malaterre, P.-O., Durand, M., Wei, R., Frasson, R. P. M., and Domeneghetti, A. (2018a). Discharge Estimation in Ungauged Basins Through Variational Data Assimilation: The Potential of the SWOT Mission. *Water Resources Research* **54**, 2405-2423.
- 45 Oubanas, H., Gejadze, I., Malaterre, P.-O., and Mercier, F. (2018b). River discharge estimation from synthetic SWOT-type observations using variational data assimilation and the full Saint-Venant hydraulic model. *Journal of Hydrology* **559**, 638-647.
- Pease, L. A., Fausey, N. R., Martin, J. F., and Brown, L. C. (2017). Projected climate change effects on subsurface drainage and the performance of controlled drainage in the Western Lake Erie Basin. *Journal of Soil and Water Conservation* **72**, 240-250.
- 50

- Perrin, C., Michel, C., and Andréassian, V. (2001). Does a large number of parameters enhance model performance? Comparative assessment of common catchment model structures on 429 catchments. *Journal of Hydrology* **242**, 275-301.
- Piniewski, M., Marcinkowski, P., Koskiahho, J., and Tattari, S. (2019). The effect of sampling frequency and strategy on water quality modelling driven by high-frequency monitoring data in a boreal catchment. *Journal of Hydrology* **579**, 124186.
- Reichle, R. H. (2008). Data assimilation methods in the Earth sciences. *Advances in Water Resources* **31**, 1411-1418.
- Ruidisch, M., Bartsch, S., Kettering, J., Huwe, B., and Frei, S. (2013). The effect of fertilizer best management practices on nitrate leaching in a plastic mulched ridge cultivation system. *Agriculture, Ecosystems & Environment* **169**, 21-32.
- Santos, L. (2018). Perspectives for hydrological supermodels: evaluation of a method based on a dynamical combination of rainfall-runoff models, Doctorat en Hydrologie, AgroParisTech.
- Schnebelen, N., Nicoullaud, B., Bourennane, H., Couturier, A., Verbeque, B., Revalier, C., Bruand, A., and Ledoux, E. (2004). The STICS model to predict nitrate leaching following agricultural practices. *Agronomie* **24**, 423-435.
- Schoumans, O., Silgram, M., Groenendijk, P., Bouraoui, F., Andersen, H., Kronvang, B., Behrendt, H., Arheimer, B., Johnsson, H., and Panagopoulos, Y. (2009). Description of nine nutrient loss models: capabilities and suitability based on their characteristics. *Journal of Environmental Monitoring* **11**, 506-514.
- Skaggs, R. W., Brevé, M. A., and Gilliam, J. W. (1994). Hydrologic and water quality impacts of agricultural drainage\*. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology* **24**, 1-32.
- Smith, W., Grant, B., Qi, Z., He, W., VanderZaag, A., Drury, C. F., and Helmers, M. (2020). Development of the DNDC model to improve soil hydrology and incorporate mechanistic tile drainage: A comparative analysis with RZWQM2. *Environmental Modelling & Software* **123**, 104577.
- Sobol, I. M. (1993). Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models. *Mathematical modelling and computational experiments* **1**, 407-414.
- Tilman, D., Balzer, C., Hill, J., and Befort, B. L. (2011). Global food demand and the sustainable intensification of agriculture. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **108**, 20260-20264.
- Tournebize, J., Chaumont, C., and Mander, Ü. (2017). Implications for constructed wetlands to mitigate nitrate and pesticide pollution in agricultural drained watersheds. *Ecological Engineering* **103**, 415-425.
- Tournebize, J., Gramaglia, C., Birmant, F., Bouarfa, S., Chaumont, C., and Vincent, B. (2012). Co-design of constructed wetlands to mitigate pesticide pollution in a drained catch-basin: a solution to improve groundwater quality. *Irrigation and Drainage* **61**, 75-86.
- Tunqui Neira, J. M., Andréassian, V., Tallec, G., and Mouchel, J. M. (2020). Technical note: A two-sided affine power scaling relationship to represent the concentration–discharge relationship. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* **24**, 1823-1830.
- Van Meter, K. J., Basu, N. B., Veenstra, J. J., and Burras, C. L. (2016). The nitrogen legacy: emerging evidence of nitrogen accumulation in anthropogenic landscapes. *Environmental Research Letters* **11**, 035014.
- Wang, Z.-H., and Li, S.-X. (2019). Chapter Three - Nitrate N loss by leaching and surface runoff in agricultural land: A global issue (a review). In "Advances in Agronomy" (D. L. Sparks, ed.), Vol. 156, pp. 159-217. Academic Press.

- Williams, M. R., Penn, C. J., and McAfee, S. J. (2022). Source and transport controls on nutrient delivery to tile drains. *Journal of Hydrology* **612**, 128146.
- Zhang, X., Srinivasan, R., Zhao, K., and Liew, M. V. (2009). Evaluation of global optimization algorithms for parameter calibration of a computationally intensive hydrologic model. *Hydrological Processes* **23**, 430-441.
- 5 Zhang, X. Y., Trame, M. N., Lesko, L. J., and Schmidt, S. (2015). Sobol Sensitivity Analysis: A Tool to Guide the Development and Evaluation of Systems Pharmacology Models. *CPT: pharmacometrics & systems pharmacology* **4**, 69-79.
- 10 Zhu, C., Byrd, R. H., Lu, P., and Nocedal, J. (1997). Algorithm 778: L-BFGS-B: Fortran subroutines for large-scale bound-constrained optimization. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)* **23**, 550-560.



### Conclusion de la partie III

---

L'assimilation de données variationnelle (VarDA) a été implémentée sur les deux modèles de drainage agricoles (SIDRA-RU et NIT-DRAIN) en perspective de leur futur couplage en série. De plus, l'analyse de sensibilité par la méthode de l'adjoint a été appliquée aux deux modèles de drainage afin d'évaluer l'impact des paramètres d'entrée sur leurs sorties respectives. L'utilisation de telles techniques a nécessité la disponibilité du code adjoint aux deux modèles qui a pu être généré en s'appuyant sur l'outil de différentiation automatique « Tapenade ».

Le premier chapitre concernait l'implémentation de l'analyse de sensibilité, de l'assimilation de données variationnelle et de la méthode couplée « Bayésienne-Variationnelle » sur le modèle SIDRA-RU. Les résultats ont montré que les paramètres qui impactent le plus le débit de drainage (sortie de SIDRA-RU) sont ceux qui contrôlent la vitesse de transfert de l'eau dans le sol et la dynamique de la hauteur de nappe.

Par ailleurs, nous avons noté une amélioration de la qualité des simulations du débit de drainage et plus particulièrement du volume drainé suite à l'estimation des paramètres du modèle avec la méthode d'assimilation de données variationnelle. En dehors des bonnes performances de simulation de débit obtenues avec la VarDA, nous avons constaté l'existence potentielle des phénomènes d'équifinalité et de la non-unicité des paramètres estimés dues à leur convergence vers des minimums locaux. De plus, la solution finale (jeu de paramètres optimal) est généralement dépendante de la valeur initiale attribuée à chaque paramètre estimé (background). Pour faire face à ces problématiques, nous avons mis en place une nouvelle approche couplée « Bayésienne-Variationnelle » qui a fortement contribué à la stabilisation du jeu de paramètres du modèle SIDRA-RU.

Le deuxième chapitre a été consacré à l'implémentation des méthodes d'analyse de sensibilité globale et d'assimilation de données variationnelle sur le modèle de transfert des nitrates (NIT-DRAIN). L'étude de l'impact des entrées du modèle NIT-DRAIN sur les données de concentration en nitrates (sortie) vient compléter les résultats du chapitre II.2 et plus généralement de la partie II de ce manuscrit. En effet, cette étude nous a permis d'identifier le paramètre  $\theta$  (teneur en eau à la capacité au champ) comme étant celui qui a le plus d'impact sur la sortie de NIT-DRAIN. Ce paramètre est important car il caractérise la fraction de la porosité du sol qui contribue au transfert rapide des nitrates vers le drain.

Ensuite, nous avons étudié l'impact de la fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrates sur l'estimation des reliquats azotés entrée hiver équivalents (estimés par le modèle) et

la qualité de la concentration en nitrate simulée. Les résultats montrent qu'une fréquence d'échantillonnage décadaire permet de limiter à 8% l'erreur sur les estimations du REHe. De même, la qualité des concentrations en nitrate simulées demeurent acceptable ( $NSE > 0$ ) en considérant une fréquence d'échantillonnage décadaire.

Finalement, l'estimation de l'évolution horaire du stock de nitrate dans les compartiments superficiels (FC et SSC) par la méthode d'assimilation de données variationnelle a permis la prise en compte indirecte de l'impact de la fertilisation printanière et des transformations biogéochimiques. Ces processus sont généralement gérés par un module agronomique difficilement paramétrable et nécessitant la disponibilité d'un ensemble de données peu disponibles (ex. données de culture, pratiques agricoles).

## **IV - Discussion et conclusion générale**

---

Dans ce chapitre, nous rappellerons, en premier lieu, les objectifs de la thèse. Ensuite, nous présenterons et discuterons les principaux résultats obtenus. Finalement, nous répondrons aux questions scientifiques de la thèse ce qui ouvrira sur les perspectives envisageables pour d'autres applications de notre approche de modélisation.

### **IV.1 : Rappel des objectifs de la thèse**

---

La mesure de la quantité des nitrates disponible à faible profondeur du sol s'opère d'une manière ponctuelle en analysant un échantillon du sol généralement prélevé à l'aide d'une tarière à des endroits précis de la parcelle agricole. Ce type de mesure a une portée spatiale très limitée vu l'hétérogénéité de la texture du sol, de la couverture végétale et des apports de fertilisants. De plus, le suivi continu de l'évolution du stock des nitrates dans le sol est très chronophage et onéreux.

Les outils de modélisation hydrologique et de qualité de l'eau peuvent jouer un rôle très important dans la quantification des exportations de l'eau et des polluants vers les milieux aquatiques. Cela permet de lever la barrière d'absence ou de présence limitée d'observations (ex. bassin versant non jaugé, faible fréquence d'échantillonnage). L'implémentation des techniques d'assimilation de données (AD) sur des modèles hydrauliques et hydrologiques permet l'estimation d'un nombre conséquent de données d'entrée, de paramètres et de variables d'état qui sont généralement distribuées dans le temps et/ou dans l'espace (Oubanas et al., 2018a; Oubanas et al., 2018b; Jay-Allemand et al., 2020). Une récente revue bibliographique met en avant l'application des techniques d'assimilation de données sur un ensemble de modèles de qualité de l'eau de surface (Cho et al., 2020). Malgré l'utilité avérée et l'innovation apportée par l'AD, très peu de modèles de qualité de l'eau s'appuient sur cette technique pour estimer le transfert des nutriments dans un sol agricole et décrire leur lixiviation vers les milieux aquatiques (Kivi et al., 2022).

L'objectif principal de cette thèse était de développer un indicateur de pression azotée en s'appuyant sur la technique d'assimilation de données variationnelle (4D-Var). Cette technique a été implémentée sur deux modèles de transfert de l'eau et des nitrates en milieu agricole artificiellement drainé. En effet, ce travail s'inscrivait dans une double démarche d'amélioration (1) des estimations du reliquat azoté entrée hiver (REH) et plus généralement du stock des nitrates dans le sol et (2) de la qualité des simulations du débit et de la concentration en nitrate.

Cela s'est déroulé en parallèle d'un développement d'une nouvelle approche conceptuelle de modélisation du transfert des nitrates dans les sols agricoles artificiellement drainés.

Ainsi, cette approche devait proposer une estimation des valeurs de REH moyennées à l'échelle d'un groupe de parcelles agricoles artificiellement drainées à partir des observations de concentration en nitrate à l'exutoire du réseau de drainage. La fiabilité de cette estimation dépend fortement de la qualité et de la fréquence des observations. Il est à noter que la disponibilité des observations « haute-fréquence » des concentrations en nitrate sur une longue période de temps (> 1 an) est très rare. De ce fait, à partir d'un modèle validé sur des données in-situ, nous avons déterminé à partir de quelle fréquence d'assimilation des concentrations en nitrate nous commençons à observer une incertitude marquée sur les estimations du REH.

## **IV.2 : Discussion des principaux résultats**

---

Cette discussion porte sur les deux principaux axes de cette thèse à savoir :

- A. Le développement du modèle conceptuel de transfert des nitrates sous l'impact du drainage agricole (NIT-DRAIN), sa validation sur 6 ans d'observations horaires de concentration en nitrate (site de Rampillon, 355 ha) puis l'étude de sa robustesse sur trois groupes de parcelles agricoles présentant un gradient de superficie (La Jaillièrre, 1 ha ; Chantemerle, 35 ha et Rampillon, 355 ha).
- B. L'assimilation variationnelle du débit de drainage et des concentrations en nitrate en milieu agricole artificiellement drainé en se basant, respectivement, sur les deux modèles conceptuels de drainage (SIDRA-RU) et de transfert des nitrates (NIT-DRAIN). L'effort d'implémenter l'approche d'assimilation de données sur les deux modèles est justifié par le besoin de procéder à un couplage de ces derniers afin de s'affranchir des mesures de débit. A terme, seules les données de pluie et d'évapotranspiration potentielle (ETP) seront requises pour simuler à la fois les concentrations en nitrate et estimer la quantité de nitrate disponible pour la lixiviation durant les périodes de fonctionnement hydraulique du drainage agricole.

### **IV.2.1 Le modèle NIT-DRAIN**

Nous nous sommes principalement inspirés des travaux de thèse d'Arlot (1999) et de Paris (2004) pour conceptualiser le transfert des nitrates dans les sols agricoles artificiellement drainés. En plus de son rôle agronomique (positif) et son impact environnemental (négatif), le réseau de drainage agricole peut être considéré comme un outil de compréhension des processus

de transfert des polluants d'origine agricole. Une parcelle agricole artificiellement drainée peut ainsi jouer le rôle d'un lysimètre géant en équipant son exutoire d'un dispositif de suivi continu de la qualité et de la quantité de l'eau écoulée. Dès lors, le drainage peut être désigné à la fois comme « un acteur de la pollution diffuse du sol par les nitrates et un témoin de leur transfert vers les milieux naturels ; extrait d'Arlot (1999) ». Il est à noter que si le transfert des nitrates en présence du drainage agricole peut présenter une forte dynamique sur le court terme, le bilan annuel de la lixiviation des nitrates quant à lui demeure identique.

Outre l'étude du rôle du drainage dans la quantification et le transfert des polluants, les travaux d'Arlot (1999) et de Paris (2004) mettent en avant l'existence de deux modes contrastés de transfert des nitrates dans la partie du sol située entre le drain et l'interdrain.

- L'effet d'entraînement caractérisant le transfert vertical et rapide du nitrate vers le drain.
- L'effet de dilution décrivant le transfert horizontal et lent du nitrate vers le drain.

Cette approche a été récemment exploitée pour décrire le transfert des pesticides en milieu drainé (Branger et al., 2009) avec l'exemple du modèle PESTDRAIN. En effet, ce dernier inclut un module de transport des pesticides composé de deux réservoirs conceptuels de tailles différentes et présentant des vitesses de transfert contrastées.

Tout d'abord, nous avons étudié le transfert des nitrates en milieu agricole sur un cas d'école. Un seul réservoir a été défini pour décrire la lixiviation d'un stock initial de nitrate en se basant sur une équation de transfert exponentielle. L'approche de modélisation à un seul réservoir est efficace pour reproduire la dynamique saisonnière des concentrations en nitrate. Ensuite, une approche multi réservoir a été développée pour décrire, à la fois, la dynamique saisonnière et événementielle. En effet, la présence d'une proportion non négligeable de macropores dans la partie du sol située en dessus des drains génère des écoulements préférentiels (Frey et al., 2016). Généralement, ce mode d'écoulement est le principal responsable de la lixiviation rapide et verticale des nitrates vers le drain au début de la saison de drainage. Des modèles à base physique comme MACRO (Larsbo et al., 2005) et HYDRUS (Gerke and Maximilian Köhne, 2004; Šimůnek and van Genuchten, 2008) prennent en considération cette macroporosité mais requièrent une très bonne connaissance de la texture et de la stratification des sols.

A partir de cette deuxième approche, nous avons retenu le modèle à trois réservoirs, que nous avons nommé NIT-DRAIN (Chelil et al., 2022a). Le premier réservoir proche du drain est responsable du transfert rapide des nitrates. Il s'appuie sur l'équation de transfert de Burns (1975), historiquement utilisée pour décrire la lixiviation verticale des solutés en présence des

macropores (Mary et al., 1999). Les deux autres réservoirs (connectés en série) mettent en avant le transfert résiduel lent en se basant sur l'équation de transfert exponentielle présentée par Magesan et al. (1994) puis intégrée par Arlot (1999) pour décrire les événements de dilution des nitrates.

L'approche de modélisation conceptuelle intégrée par NIT-DRAIN est originale. En effet, les concentrations en nitrate simulées par le modèle présentent des performances très intéressantes (*Figure 32*). Une telle qualité de simulation des concentrations est rarement atteinte par les modèles de transfert des nitrates existants dans la littérature. En effet, nous pouvons citer l'exemple de la modélisation de la lixiviation du bromure (traceur conservatif qui regroupe les mêmes caractéristiques de transfert dans le sol que le nitrate) dans un sol agricole artificiellement drainé au Danemark (Varvaris et al., 2021). Malgré la prise en compte de la double perméabilité du sol par le modèle HYDRUS-2D, la qualité des simulations de concentration de bromure demeure discutable. D'autres études préfèrent se baser sur la comparaison de la qualité des simulations du flux de nitrate avec des observations qui présentent souvent une faible fréquence d'échantillonnage (Ale et al., 2013; Motarjemi et al., 2021).

De plus, NIT-DRAIN présente une très bonne gestion des deux modes contrastés de transfert des nitrates. Nous avons pu constater que le phénomène d'entraînement des nitrates est prépondérant en début de saison de drainage suite à l'infiltration des premières pluies hivernales (*Figure 32C*). En cette période de l'année, les faibles profondeurs du sol sont très chargées en nitrate conséquence de la forte minéralisation de l'azote organique et aux excédents azotés issus de la fertilisation printanière. Ainsi, l'épuisement de ce stock d'azote engendre une prédominance systématique et progressive des phénomènes de dilution des nitrates.

Finalement, NIT-DRAIN présente une gestion simplifiée et efficace de l'évolution du stock des nitrates dans le sol. En effet, la structure compartimentée a été conçue afin de permettre un suivi continu de la quantité des nitrates piégée dans le sol moyennant l'estimation d'une seule valeur équivalente de reliquat par année hydrologique (REHe). Cette variable définit le stock des nitrates piégé dans le sol avant l'arrivée des premières pluies hivernales et regroupe, par ailleurs, la mémoire de l'ensemble des pratiques agricoles de l'année précédente.

Egalement, l'évolution des niveaux de stock des nitrates dans les réservoirs conceptuels du modèle NIT-DRAIN peut apporter un niveau de compréhension supplémentaire à l'hydraulique du drainage. En effet, Lesaffre (1988) avait spécifié que la saison de drainage pourrait être décomposée en trois principales phases d'écoulement. Dès lors, la période d'amorce du

drainage, qui se distingue par une saturation progressive du profil du sol, est suivie par une saison de drainage intense (SDI), synonyme d'une accélération de l'écoulement dans les drains, puis par un ralentissement général du fonctionnement du drainage (Figure 32A). D'après Lesaffre (1988), l'augmentation brusque de la valeur du coefficient de restitution  $CR$  (pente  $D/p$  sur la Figure 32A) correspond généralement à la date du passage de la période d'amorce à la saison de drainage intense.

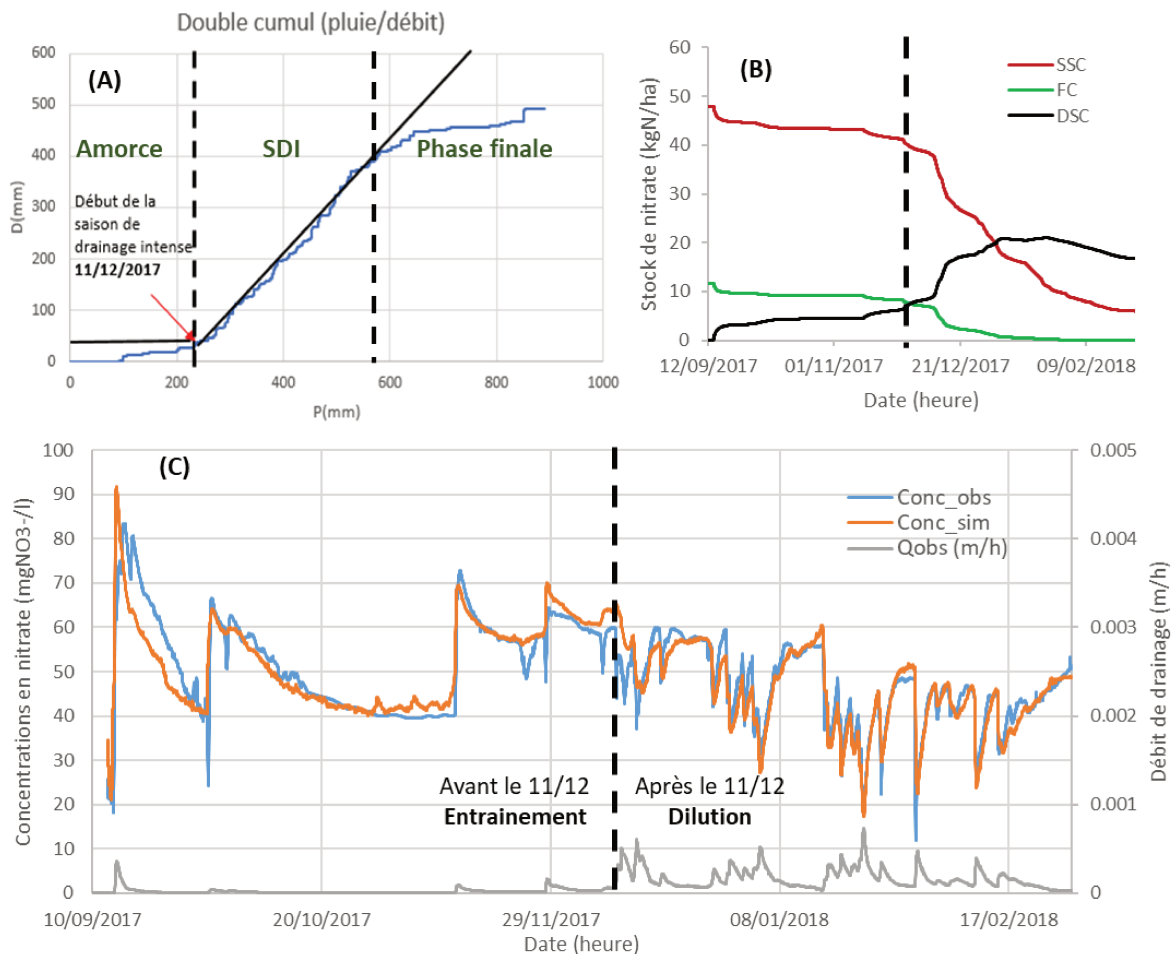


Figure 32: Ensemble de graphiques montrant l'existence d'une potentielle corrélation entre le début de la saison de drainage intense et la date correspondante au passage d'un comportement d'entraînement à celui d'une dilution des nitrates. (I) Courbe de double cumul (pluie-débit), les données ont été mesurées sur le site de Rampillon durant la saison hydrologique 2017-2018. (II) Evolution du stock des nitrates dans chaque compartiment conceptuel du modèle NIT-DRAIN. (III) Chroniques de concentrations en nitrate observées (bleu), simulées (orange) et de débit de drainage (gris)

Par le biais de la modélisation conceptuelle NIT-DRAIN, nous avons pu constater l'existence d'une corrélation entre la date du début de la saison de drainage intense et celle correspondante à la substitution du phénomène d'entraînement par celui de la dilution des nitrates (Figure 32). Afin d'illustrer l'importance de considérer les deux dynamiques de transfert des nitrates dans le sol (événementielle et saisonnière), nous nous sommes basé sur les données horaires de concentrations en nitrate mesurées à l'exutoire du bassin versant agricole artificiellement drainé

de Rampillon (355 ha) durant l'année hydrologique 2017-2018. Ainsi, le basculement entre la phase d'entraînement et celle de la dilution des nitrates (Figure 32B) se chevauche avec le moment à partir duquel la quantité des nitrates dans le réservoir rapide (FC) devient plus faible que celle stockée dans le réservoir lent profond (DSC).

Les hypothèses de modélisation telles que l'absence d'un module agronomique et la prise en compte du REHe comme le principal pilote des niveaux de concentration en nitrate durant la saison hivernale (septembre-février) ont été confirmées suite à la validation de NIT-DRAIN sur les données de trois bassins versants agricoles situés en France.

#### **IV.2.2 La robustesse du modèle NIT-DRAIN**

Dans la littérature, la validation des modèles de transfert des nitrates s'effectue généralement sur la base des données de flux de nitrate à faible fréquence d'échantillonnage. C'est le cas de l'étude de robustesse de Jabro et al. (2012) appliquée sur trois modèles de simulation de drainage et du transfert des nitrates (LEACHM (Molina and Richards, 1984), NCSWAP (Johnsson et al., 1987) et SOIL-SOILN (Eckersten et al., 1996)).

La stratégie mise en place a permis d'étudier la robustesse spatiale et temporelle du modèle NIT-DRAIN sur trois sites situés en France et présentant des superficies drainées contrastées et des données de débit et de concentrations en nitrate au pas de temps horaire. Malgré la présence d'une variabilité annuelle des paramètres, nous avons démontré l'existence d'un jeu de paramètre moyen représentatif de l'ensemble des années simulées par site d'étude. De même, la robustesse spatiale a été validée en proposant un jeu de paramètres générique aux trois sites d'étude. Ainsi, les performances de modélisation ont pu être préservées, notamment, ceux liées à la qualité des simulations de concentrations en nitrate malgré le fort gradient de superficie qui marque les trois sites d'étude (1ha à 355ha).

A l'inverse des modèles de simulation de drainage qui sont généralement dépendants de la configuration du système de drainage en place (ex. profondeur et écartement des drains), de la capacité du sol à drainer de l'eau et de la superficie des parcelles agricoles étudiées, le modèle NIT-DRAIN présente un jeu de paramètres d'entrée robuste et indépendant des processus de transfert des nitrates et des rotations culturales en place.

#### **IV.2.3 L'impact de la fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrate**

La stratégie d'échantillonnage de la concentration en nitrate est essentiellement établie en fonction de la composante étudiée. En effet, une nappe d'eau souterraine profonde présente généralement une faible dynamique des concentrations en nitrate à court terme en raison de la



faible vitesse de transfert des polluants (à l'exception des milieux karstiques où les temps de réponses peuvent être courts). De ce fait, une faible fréquence d'échantillonnage (ex. hebdomadaire, mensuelle) pourrait suffire pour suivre l'évolution de la pression azotée dans un milieu hydrologique similaire (Stuart et al., 2007). A l'inverse, des capteurs haute-fréquence de concentration en nitrates devraient être positionnés à l'exutoire des bassins versants agricoles en raison de la présence d'une forte dynamique de transfert (événementielle) qui se traduit généralement par un très court temps de réponse à un événement de pluie (de l'ordre de quelques heures).

La présence d'un réseau de drainage agricole couvrant l'ensemble de la superficie du bassin versant agricole de Rampillon (355 ha) nous a facilité l'acquisition des données de concentration en nitrate (voir la notion de drainage témoin ; Arlot (1999)). Nous nous sommes appuyé sur la disponibilité de six années de mesures de concentrations en nitrate au pas de temps horaire et de l'approche de modélisation de NIT-DRAIN (sur lequel nous avons implémenté la technique d'assimilation de données variationnelle) pour évaluer l'impact de la fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrate sur les estimations de REHe. Les principaux résultats montrent que les fréquences d'échantillonnage bimensuelles et mensuelles des concentrations en nitrate engendrent, respectivement, des erreurs inférieures à 10% et 20% sur les estimations du REHe (Chelil et al., 2022b).

Ainsi, le gestionnaire pourrait s'appuyer sur le lien que nous avons établi entre la fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrate et l'erreur sur l'estimation du REHe, afin de sélectionner la fréquence appropriée et cela suivant l'objectif de son suivi « nitrate » et le seuil d'incertitude toléré sur l'estimation du reliquat entrée hiver. En outre, il serait judicieux d'appliquer cette approche statistique sur des bassins versants agricoles présentant un gradient marqué de superficie. Cela permet de prendre en compte l'effet de la taille du bassin versant sur la dynamique du transfert des nitrates.

#### **IV.2.4 Vers une estimation simplifiée du REHe**

A une échelle spatiale regroupant plusieurs parcelles agricoles drainées, le passage d'un échantillonnage haute fréquence de concentration en nitrate (infra-journalière) à un échantillonnage journalier montre que le choix du moment de la mesure influence très peu l'estimation du REHe, vu l'aspect aléatoire de la dynamique du débit sur le court terme. Par contre, des fréquences d'échantillonnage plus espacées (mensuelles, trimestrielles) peuvent intégrer un comportement saisonnier. De plus, les programmes de mesure des concentrations

en nitrate se contentent généralement des faibles fréquences d'échantillonnage, généralement suffisantes pour décrire la dynamique saisonnière du nitrate.

De ce fait, il serait intéressant d'identifier la période de l'année permettant d'avoir le minimum d'incertitude sur les estimations des REHe, en se basant sur une faible fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrate. Pour cela, nous nous sommes basé sur les sorties du modèle NIT-DRAIN obtenues suite à la prise en compte d'une fréquence d'échantillonnage trimestrielle des concentrations en nitrate (cf. Chapitre III.2).

L'objectif est de calculer un reliquat entrée hiver opérationnel ( $REH_{op}$ ) à partir d'une observation trimestrielle de concentration en nitrates que l'on nommera «  $C_{nit}$  » et de la lame d'eau drainée cumulée  $D$ . Il est à noter que le débit de drainage (observé ou simulé) pourrait être utilisé pour calculer la lame d'eau cumulée ( $D = \sum_{t_0}^T Q$ ). En absence des données de débit, le bilan hydrique pourrait constituer une alternative pour approcher le calcul de la lame d'eau drainée en faisant intervenir le cumul de la pluie  $P$ , de l'évapotranspiration ETP et la réserve utile du sol (RU),

$$D = P - ETP - RU \quad (IV.1)$$

Nous avons regroupé mensuellement, les erreurs relatives sur les REHe obtenues en assimilant les données trimestrielles de concentration en nitrate (mesurées à l'exutoire du bassin versant agricole de Rampillon) par le modèle NIT-DRAIN (cf. Chapitre III.2). Ces valeurs d'incertitudes sur les estimations de REHe sont résumées mensuellement sous forme de boîtes à moustache (Figure 33). Nous remarquons que le mois de janvier intègre, en moyenne, les plus faibles erreurs sur les REHe si l'on se réfère au nombres d'observations  $N$  (représentativité).

De ce fait, les résultats de la *Figure 33* laissent supposer que la mesure des concentrations en nitrate ( $C_{nit}$ ) doit s'effectuer durant le mois de janvier et sur un épisode de tarissement de débit afin de minimiser l'incertitude sur les estimations de REHe. Ainsi, la formule exponentielle pourrait être utilisée pour calculer le stock initial des nitrate  $S_0$  piégé au-dessus des drains, reposants sur un imperméable à une profondeur  $p$  et au sein d'un sol présentant une porosité de lessivage  $\theta$  (Arlot, 1999; Tournebize et al., 2008).

$$S_0 = REH_{op} = \frac{C_{nit} * D}{1 - \exp\left(-\frac{D}{\theta * p}\right)} \quad (IV.2)$$

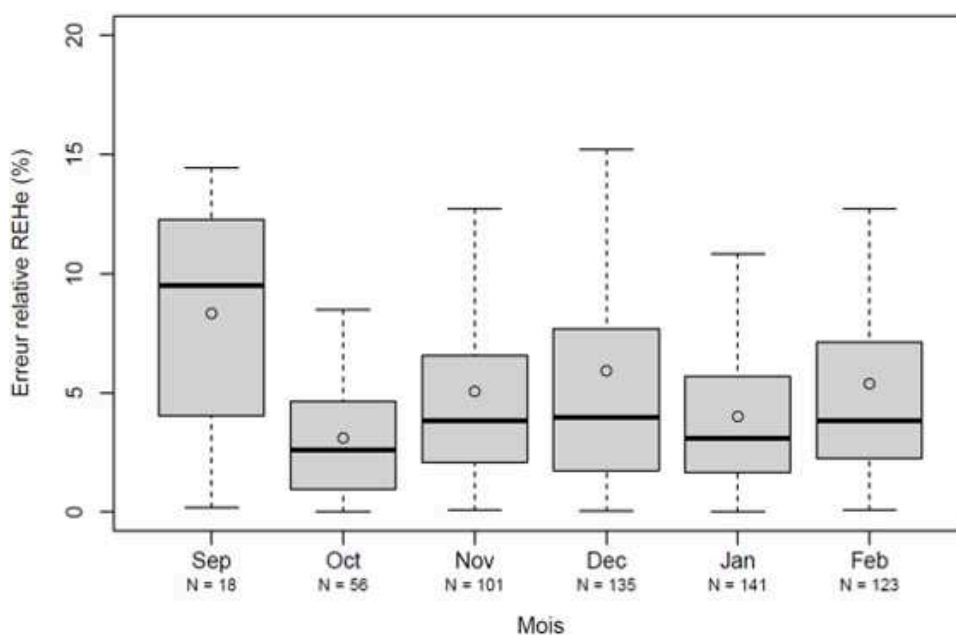


Figure 33: Statistique mensuelle sous forme de boxplot sur les erreurs relatives des REHe estimés suivant une fréquence d'échantillonnage trimestrielle ; N correspond au nombre de données (concentrations en nitrate) – Site de Rampillon – Période 2014-2019

Nous pouvons observer que les reliquats entrée hiver ( $REH_{op}$ ) calculés à partir de la formule IV.2 sont comparables aux mesures moyennées sur le bassin versant agricole de Rampillon (Tableau 10). Cela sous-entend qu'une donnée trimestrielle de concentration en nitrate, mesurée en mois de janvier durant une période de tarissement, permet d'approximer le stock des nitrates dans le sol au début d'hiver avec le minimum d'incertitudes.

Tableau 10: Comparaison entre les reliquats entrée hiver mesurés à Rampillon et ceux calculés suivant la formule exponentielle (IV.2)

Année hydrologique	REH (Mesuré)	$REH_{op}$ (opérationnel)
2014-2015	49	48.3
2015-2016	72	48.8
2016-2017	78	ND
2017-2018	66	65.5
2018-2019	ND	36
2019-2020	37	44.7

Les systèmes de drainage rendent accessible la mesure de la valeur de concentration en nitrate à l'exutoire des parcelles agricoles. Cette mesure est représentative de l'ensemble des pratiques agricoles du bassin versant considéré. De même, les valeurs de REHe estimées par le modèle ou de  $REH_{op}$  calculés par la formule IV.2 correspondent à des quantités moyennées

représentatives de l'ensemble des pratiques agricoles et des processus de transformation et de transfert de l'azote se produisant à l'échelle du bassin versant agricole.

Ainsi, nous pourrions estimer l'évolution dans le passé du reliquat entrée hiver, en se basant sur une longue chronique de concentration en nitrates (ex. Mélarchez, 50 ans de données de l'observatoire Orgeval-ORACLE appartenant au réseau OZCAR). Les agences de l'eau pourraient exploiter la valeur du REHe ou du REH<sub>op</sub> en tant qu'indicateur de pression azotée afin d'évaluer d'efficacité des plans d'actions, mises en place pour maîtriser la pollution de l'eau par les nitrates.

#### **IV.2.5 La valeur ajoutée de l'assimilation de données variationnelle**

L'algorithme d'assimilation de données variationnelle a été correctement implémenté sur les deux modèles de simulation de drainage SIDRA-RU (Chelil et al., 2022c) et de transfert des nitrate NIT-DRAIN (Chelil et al., 2022a).

En plus de son efficacité à correctement estimer les paramètres d'entrée de chaque modèle, cette technique permet aussi d'avoir un accès direct à des variables internes décrivant les processus de transfert de l'eau et des nitrates dans les sols agricoles artificiellement drainés.

Ainsi, la 4D-Var nous a permis d'estimer l'évolution horaire de la quantité des nitrates dans le sol en réajustant les valeurs du stock d'azote des deux réservoirs de surface intégrés au modèle NIT-DRAIN. A l'inverse d'une utilisation classique du modèle où seule la période hivernale est considérée (estimation d'une seule valeur de REHe par année hydrologique), l'accès aux variables d'état du modèle (FC et SSC) nous a permis de prendre en compte l'intégralité de l'année hydrologique. Dès lors, l'estimation des excédents de nitrate lixiviés suite à l'application de la fertilisation printanière devient possible (Chelil et al., 2022b). Cela représente un avantage non négligeable par rapport aux modèles agronomiques très complexes qui proposent le calcul des variations du stock des nitrates dans le sol (ex. STICS).

L'implémentation de l'AD variationnelle sur le modèle NIT-DRAIN nous permet d'envisager, dans un second temps, l'analyse de l'impact de la fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrate sur la qualité des estimations du stock d'azote dans le sol. En effet, une fréquence d'échantillonnage optimale pourrait être définie afin de préserver la qualité des estimations tout en proposant un suivi peu onéreux des concentrations en nitrate.

Contrairement aux méthodes classiques de calage d'un modèle, l'assimilation de données ne permet pas de produire des estimations d'entrée en absence des données d'observations. Dans

notre exemple, la non disponibilité des observations de concentration en nitrate est très fréquente lors de la saison sèche. Cela est dû à l'absence d'écoulement dans les réseaux de drainage. Dans de tels situations, une utilisation simultanée et couplée du modèle direct et du modèle inverse (adjoint) prend du sens. Nous pourrions, ainsi, proposer une estimation de l'évolution du stock des nitrates en se basant sur la technique d'assimilation de données variationnelle lorsque les données de concentration sont disponibles. Dans le cas contraire, le stock des nitrates devrait être estimé avec le modèle direct (sans AD, (Chelil et al., 2022a)).

Dans nos travaux de modélisation avec le modèle SIDRA-RU, nous avons assimilé les débits de drainage au pas de temps journalier afin d'estimer l'évolution temporelle de la recharge R (variable interne du modèle SIDRA-RU). Dans une telle situation, l'estimation de la variable d'entrée ETP (évapotranspiration potentielle) et/ou du coefficient cultural  $K_c$  devient possible en supposant que la donnée de pluie est fiable. Dès lors, les performances décrivant la qualité des simulations de débit sont comparables quelle que soit l'approche d'optimisation utilisée (AD variationnelle, méthode classique de calage AirGR (Coron et al., 2020)). A l'inverse, les résultats ont été peu concluants lors de la période d'été, majoritairement, en raison de l'absence des observations de débit. Afin de pallier à ce manque d'observations, nous pourrions proposer le même schéma de modélisation proposé ci-dessus (complémentarité du modèle direct et adjoint). Dans tous les cas, les algorithmes d'optimisation des entrées (Zhu et al., 1997), implémentés dans le cadre d'une assimilation de données variationnelle, permettent l'estimation d'un grand nombre de paramètres/variables d'entrée d'un modèle (Jay-Allemand et al., 2020). A l'inverse, les méthodes classiques de calage sont très performantes pour identifier les minimums globaux mais ont tendance à considérer un nombre limité de paramètres dans le but d'assurer un temps de calcul raisonnable (Coron et al., 2020).

Cela est d'autant plus valable pour tester la sensibilité des sorties des modèles SIDRA-RU et NIT-DRAIN par rapport à leurs entrées respectives. En effet, le calcul du gradient de la fonction réponse par le code adjoint permet d'identifier, en une seule exécution, l'impact d'un nombre conséquent d'entrées sur les sorties de ces modèles.

## IV.3 : Perspectives

---

### IV.3.1 La qualité des débits simulés

L'assimilation de données variationnelle a été implémentée au modèle de drainage SIDRA-RU (Henine et al., 2022) en perspective d'un futur couplage avec NIT-DRAIN. Une telle configuration permettra de s'affranchir des données observées de débit de drainage (Figure 1) Le modèle couplé « SIDRA-RU/NIT-DRAIN » nécessitera les données de pluie et d'évapotranspiration, souvent facilement accessible au pas de temps journalier (ex. la base de données SAFRAN, (Vidal et al., 2010)).

D'après nos résultats, la qualité des simulations de débit de drainage au début de la saison de drainage (à l'ouverture du bilan hydrique) est déterminante quant à la bonne représentation des concentrations en nitrate en cette même période (Chelil et al., 2022a; Henine et al., 2022). En effet, le début de la saison de drainage est généralement synonyme d'une contribution conséquente du réservoir rapide (*FC compartment*) au flux total de nitrate exporté. Par conséquent, les erreurs sur les faibles débits de drainage enregistrés en cette période sont, en grande partie, responsables de la mauvaise qualité des simulations de concentration en nitrates.

### IV.3.2 Vers un futur couplage des modèles SIDRA-RU et NIT-DRAIN

Les modèles de transfert des nitrates NIT-DRAIN (Chelil et al., 2022a) et de la simulation du drainage SIDRA-RU (Chelil et al., 2022c; Henine et al., 2022) ont été évalué séparément. Le but final est de proposer un modèle couplé qui intégrera à la fois l'hydrologie du drainage agricole et la qualité de l'eau. L'une des solutions les plus simples à mettre en place serait de construire un modèle couplé en cascade (en série). Ainsi, le débit de drainage simulé par le modèle SIDRA-RU est utilisé comme donnée d'entrée du modèle NIT-DRAIN.

Ce schéma de modélisation a été testé sur les données journalières de débit et des concentrations en nitrate mesurées à l'exutoire du système drainant du groupe de parcelles agricoles de Rampillon (Chelil et al., 2022a). Dès lors, le remplacement des débits observés par ceux simulés par le modèle SIDRA-RU engendre davantage d'incertitudes sur les concentrations en nitrate simulées, notamment au début de la saison de drainage. En effet, une faible variabilité des données de concentration en nitrate est généralement observable durant la saison de drainage intense indépendamment des fortes valeurs du débit que l'on peut remarquer en cette même période. Cela diffère au début de la saison de drainage car une sous/sur estimation du débit qui semble acceptable dans le cadre d'une modélisation hydrologique peut engendrer des erreurs non négligeables sur les valeurs simulées de concentration en nitrate.

L'algorithme d'assimilation de données variationnelle a été implémenté sur les deux modèles de drainage (i.e., NIT-DRAIN et SIDRA-RU) dans l'optique de leur futur couplage. Une fois couplés, les paramètres des deux modèles pourront être estimés séparément ou en parallèle. De même, la fonction coût  $J$  définie aux chapitres III.1 et III.2 intégrera l'écart entre les observations et les simulations des concentrations en nitrate et du débit de drainage. Une pondération des deux composantes de  $J$  pourrait être nécessaire suivant l'objectif de performance recherché (i.e., amélioration de la qualité des simulations de débit et/ou des concentrations en nitrate).

Egalement, nous pourrions envisager un calage des paramètres d'entrée des deux modèles en ciblant les faibles débits de drainage. Dans ce contexte, Lemaitre-Basset et al. (2021) avait construit une fonction objective basée sur le critère du KGE (Gupta et al., 2009) regroupant, ainsi, les valeurs du débit et l'inverse de ce dernier pour représenter les forts et faibles débits, respectivement. En outre, le débit de drainage pourrait être considéré comme une variable interne du modèle couplé. Dans ce cas, seule la qualité de la donnée de concentration en nitrate sera évaluée en sortie du modèle couplé.

#### **IV.3.3 Le besoin d'une étude poussée de la robustesse du modèle NIT-DRAIN**

Au-delà des performances élevées obtenues par NIT-DRAIN qui se traduisent par une bonne qualité des concentrations en nitrate simulées, les limites de validité de l'étude de la robustesse de ce modèle doivent être discutées.

Dans cette thèse, trois échelles spatiales ont été considérées confirmant l'adaptabilité du modèle NIT-DRAIN à différentes tailles de bassin versant. Cependant, il serait intéressant et nécessaire de renforcer la base de données existante avec davantage de localisations (sites d'étude) afin de considérer l'hétérogénéité de la texture du sol et du climat.

En effet, NIT-DRAIN a été validé sur des données de concentration en nitrate issues d'un ensemble de parcelles agricoles artificiellement drainées situées en France. Nous avons donc pu tester les performances du modèle NIT-DRAIN sur des sols limoneux et un climat océanique tempéré. Il est à noter que NIT-DRAIN prend en considération l'effet d'une nappe perchée formée au-dessus d'une couche imperméable sur laquelle le système de drainage est posé.

Il serait donc judicieux d'élargir le champ de validation à d'autres types de sol et plus généralement à d'autres contextes de fonctionnement hydraulique du drainage. L'exemple du drainage hollandais pourrait être cité où les sols agricoles drainés sont généralement impactés par la remontée des eaux marines salées (Velstra et al., 2011). Le cas du drainage agricole

américain (USA) est en grande partie influencé par la présence de la texture du sol sableuse qui favorise la lixiviation rapide des polluants vers les cours d'eau naturels (L. Campbell et al., 1985). Aussi, le climat de type continental qui couvre la région « Midwest » au Etats-Unis est marqué par un été souvent humide, conséquence d'une pluviométrie importante (Valayamkunnath et al., 2022).

Les observations de débit et de concentrations en nitrates utilisées pour évaluer la robustesse du modèle regroupent au total quatorze (14) années de données au pas de temps horaire. Augmenter le nombre d'années d'observations permettra de limiter les effets d'équifinalité et améliorera, ainsi, la fiabilité des paramètres estimés. Dans ce contexte, Jeantet et al. (2021) avait entrepris l'étude de la robustesse du modèle SIDRA-RU à l'échelle nationale (France) en faisant intervenir 200 années cumulées de données journalières de débit de drainage réparties sur 22 parcelles agricoles. Les données présentent une hétérogénéité spatiale et les résultats démontrent l'aptitude du modèle SIDRA-RU à correctement simuler l'évolution des débits de drainage. Une étude similaire est préconisée pour le modèle NIT-DRAIN sous réserve de disponibilité des données de concentration en nitrate.

En effet, la faible fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrate constitue un frein majeur quant à la possibilité de valider un jeu de paramètres générique et représentatif par type de sol ou suivant un climat spécifique. Burt et al. (2010) ont insisté sur la nécessité de construire des bases de données intégrant un suivi sur le long terme de la concentration en nitrate (> 30 ans), comme c'est disponible pour le site de Mélarchez (observatoire Orgeval-ORACLE). Cela permettra de tester la robustesse du modèle sur un jeu de données intégrant une hétérogénéité interannuelle des processus de transfert des nitrates (ex. succession d'années sèches et humides et variabilité des pratiques agricoles). Egalement, la disponibilité d'une base de données conséquente permettra de valider proprement la robustesse temporelle des paramètres du modèle. De même, il serait judicieux de mettre en place une étude de robustesse dans le but de comparer NIT-DRAIN à d'autres modèles de transfert des nitrates en milieu drainé. L'idée est d'analyser les performances de ces modèles sur des jeux de données similaires (Jeantet et al., Submitted).

#### **IV.3.4 Prise en compte d'une nappe permanente sous le réseau de drainage**

En plus de la nécessité d'explorer le fonctionnement du modèle NIT-DRAIN sur davantage de contextes hydroclimatiques et pédologiques, nous suggérons de prendre en considération l'effet de la présence d'une nappe souterraine permanente sur la dynamique saisonnière des concentrations en nitrate.



L'infiltration profonde de l'eau de pluie sous les drains vers les nappes sous-jacentes est généralement chargée en polluants d'origine agricole. Cela a pour conséquence la contamination de la nappe d'eau souterraine. La modélisation du processus d'infiltration profonde permet de mettre en évidence la dégradation de la qualité des eaux souterraines (Refsgaard et al., 1999). C'est plutôt le processus inverse que nous voudrions conceptualiser. En effet, l'eau exportée par les drains se voit impactée par la remontée hivernale du niveau de la nappe profonde généralement chargée en nitrate.

Pour prendre en compte la contribution de la nappe au flux total des nitrates, nous disposons d'une chronique journalière de données de concentration en nitrate regroupant au total plus de 45 ans de données sur le site de Mélarchez. Ce site est situé en région parisienne, en France. C'est un sous bassin versant agricole majoritairement drainé par des tuyaux enterrés et totalisant une superficie de 700 ha. Ce dernier fait partie du grand bassin versant agricole de l'Orgeval (Tallec, 2012), un observatoire scientifique longuement instrumenté par l'institut de recherche INRAE Antony- Jouy en Josas (anciennement : centre d'Antony d'IRSTEA et CEMAGREF).

Une des solutions préconisées pour tenir compte de la contribution de la nappe profonde serait de rajouter un module supplémentaire « nappe » connecté au réservoir lent profond (*DSC compartment*). Dès lors, nous pourrions imaginer une fonction de transfert qui calculera le flux de nitrate entrant et donc le signal de concentration en nitrate équivalent lorsque le niveau de la nappe souterraine contribue au débit de drainage.

#### **IV.3.5 Modéliser le transfert des pesticides avec l'approche NIT-DRAIN**

L'approche de modélisation du transfert des nitrates en milieu agricole artificiellement drainé pourrait être étendue pour décrire l'évolution des concentrations en pesticide dans les eaux de drainage. En effet, nous pourrions proposer une adaptation du modèle PESTDRAIN (Branger et al., 2009) en utilisant le principe de fonctionnement de NIT-DRAIN et envisager l'application de la technique d'assimilation de données variationnelle pour quantifier l'évolution du stock de pesticide dans le sol.

Il est à noter que les données « haute fréquence » des concentrations en pesticide n'existent que rarement sur le terrain. Dès lors, l'estimation variationnelle de la dynamique des pesticides dans le sol à l'échelle de l'événement pourrait être rendue assez complexe. Toutefois, nous pourrions considérer l'application de l'assimilation de données variationnelle afin d'estimer le stock des pesticides à partir d'une faible fréquence d'échantillonnage des concentrations (ex.

bimensuelle) puis de recréer, à l'aide du modèle direct, de la donnée (concentrations en pesticide) à des pas de temps plus fins (ex. journalier).

La forte réactivité des molécules de pesticide aux épisodes de pluie, marquée par des effets prépondérants d'entraînement peut nécessiter une potentielle ré-estimation du paramètre de partage du stock ( $\alpha$ ) afin de donner plus de poids au compartiment rapide.

Par ailleurs, une attention particulière devrait être portée sur la diversité des molécules de pesticide. En effet, le comportement physicochimique du pesticide pourrait largement différer d'une molécule à une autre, ce qui peut rendre complexe la mise en place d'une l'approche de modélisation générique.

#### **IV.4 : La thèse en quelques phrases**

---

- La mise en évidence des phénomènes d'entraînement et de dilution des concentrations en nitrate à travers la modélisation conceptuelle du transfert en milieu agricole artificiellement drainé.
- L'amélioration des simulations des concentrations en nitrate en contexte de drainage agricole suite au développement d'un nouveau modèle conceptuel (NIT-DRAIN) de type réservoirs.
- L'implémentation de la technique d'assimilation de données variationnelle sur le modèle NIT-DRAIN nous a permis d'évaluer la fréquence d'échantillonnage des concentrations en nitrate à partir de laquelle les valeurs estimées du REHe deviennent peu fiables.
- L'estimation des entrées des modèles NIT-DRAIN et SIDRA-RU a été améliorée suite au développement et à l'implémentation de leurs codes adjoints respectifs.
- L'évaluation de l'impact de la fertilisation printanière a été rendue possible grâce à l'estimation de l'évolution temporelle de la quantité des nitrates stockée dans le sol avec l'assimilation de données variationnelle.

## Références

- Agrawal, G., Lunkad, S., and Malkhed, T. (1999). Diffuse agricultural nitrate pollution of groundwaters in India. *Water science and technology* **39**, 67-75.
- Ale, S., Gowda, P. H., Mulla, D. J., Moriasi, D. N., and Youssef, M. A. (2013). Comparison of the performances of DRAINMOD-NII and ADAPT models in simulating nitrate losses from subsurface drainage systems. *Agricultural Water Management* **129**, 21-30.
- Allaire, G. (2015). A review of adjoint methods for sensitivity analysis, uncertainty quantification and optimization in numerical codes.
- Almasri, M. N., and Kaluarachchi, J. J. (2004). Assessment and management of long-term nitrate pollution of ground water in agriculture-dominated watersheds. *Journal of Hydrology* **295**, 225-245.
- Alzraiee, A. H., Gates, T. K., and Garcia, L. A. (2013). Modeling Subsurface Heterogeneity of Irrigated and Drained Fields. II: Multivariate Stochastic Analysis of Root-Zone Hydrosalinity and Crop Yield. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering* **139**, 809-820.
- Andersson, J., Åkesson, J., and Diehl, M. (2012). CasADi: A symbolic package for automatic differentiation and optimal control. In "Recent advances in algorithmic differentiation", pp. 297-307. Springer.
- AQU'Brîe (n.d). Connaissance et protection de l'aquifère du Champigny. Vol. 2021, pp. <https://www.aquibrîe.fr/>.
- Arheimer., and al, e. (2010). Development and testing of the HYPE (Hydrological Predictions for the Environment) water quality model for different spatial scales. *Hydrology research* **41**, 295-319.
- Arlot, M.-P. (1999). Nitrates dans les eaux : Drainage acteur, drainage témoin ? Les enseignements d'une approche hydrologique et hydraulique sur (1) l'influence du drainage agricole sur la contamination diffuse des eaux par les nitrates et (2) sur les possibilités d'utiliser les parcelles drainées pour l'analyse de la dite contamination.
- Arnold, J., Moriasi, D., Gassman, P., Abbaspour, K., White, M., Srinivasan, R., Santhi, C., Harmel, R., van Griensven, A., Van Liew, M., Kannan, N., and Jha, M. (2012). SWAT: Model use, calibration, and validation. **55**.
- ARVALIS (2021). Toute l'info pour gérer son exploitation agricole. Vol. 2021, pp. <https://www.arvalis-infos.fr/index.html>.
- Bado, B. V. (2002). Rôle des légumineuses sur la fertilité des sols ferrugineux tropicaux des zones guinéenne et soudanienne du Burkina Faso.
- Ballif, J., Herre, C., and Gobert, D. (1996). Les lysimètres en sol de craie de Châlons-sur-Marne. In "Trente ans de lysimétrie en France 1960–1990", pp. 115-149. COMIFER-INRA Editions Paris.
- Bar-Yosef, B. (1999). Advances in fertigation. *Advances in agronomy* **65**, 1-77.
- Beaudoin, N., Venet, E., Maucorps, J., Vandenberghe, C., Pugeaux, N., Viennot, P., Gourcy, L., Brayer, C., Machet, J.-M., and Couturier, A. (2021). Long term response of water and nitrogen fluxes to Good Agricultural Practices at field and catchment scales. *Science of the Total Environment* **776**, 145954.
- Bertino, L., Evensen, G., and Wackernagel, H. (2003). Sequential data assimilation techniques in oceanography. *International Statistical Review* **71**, 223-241.
- Beven, K. (1989). Changing ideas in hydrology — The case of physically-based models. *Journal of Hydrology* **105**, 157-172.
- Billen, G., Garnier, J., Benoît, M., and Anglade, J. (2013). La cascade de l'azote dans les territoires de grande culture du Nord de la France. *Cahiers agricultures* **22**, 272-281 (1).

- Billy, C. (2008). Transfert et rétention d'azote à l'échelle d'un bassin versant agricole artificiellement drainé, Thèse de doctorat, Ecole doctorale Géosciences et Ressources Naturelles ....
- Birgand, F., Faucheux, C., Gruau, G., Augeard, B., Moatar, F., and Bordenave, P. (2010). Uncertainties in assessing annual nitrate loads and concentration indicators: Part 1. Impact of sampling frequency and load estimation algorithms. *Transactions of the ASABE* **53**, 437-446.
- Blann, K. L., Anderson, J. L., Sands, G. R., and Vondracek, B. (2009). Effects of Agricultural Drainage on Aquatic Ecosystems: A Review. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology* **39**, 909-1001.
- Blondel, J. (2008). Les changements globaux. *Forêt Méditerranéenne* **XXIX**, 119-126.
- Branger, F., Tournebize, J., Carluer, N., Kao, C., Braud, I., and Vauclin, M. (2009). A simplified modelling approach for pesticide transport in a tile-drained field: The PESTDRAIN model. *Agricultural Water Management* **96**, 415-428.
- Brisson, N., Gary, C., Justes, E., Roche, R., Mary, B., Ripoche, D., Zimmer, D., Sierra, J., Bertuzzi, P., and Burger, P. (2003). An overview of the crop model STICS. *European Journal of agronomy* **18**, 309-332.
- Burns, I. G. (1975). An equation to predict the leaching of surface-applied nitrate. *The Journal of Agricultural Science* **85**, 443-454.
- Burt, T., Howden, N., Worrall, F., and Whelan, M. (2010). Long-term monitoring of river water nitrate: how much data do we need? *Journal of Environmental Monitoring* **12**, 71-79.
- CGEDD (2020). Rapport annuel du conseil général de l'environnement et du développement durable.
- Chaubey, I., Haan, C. T., Salisbury, J. M., and Grunwald, S. (1999). Quantifying Model Output Uncertainty Due To Spatial Variability Of Rainfall. *JAWRA Journal of the American Water Resources Association* **35**, 1113-1123.
- Chelil, S., Henine, H., Chaumont, C., and Tournebize, J. (2022a). NIT-DRAIN model to simulate nitrate concentrations and leaching in a tile-drained agricultural field. *Agricultural Water Management* **271**, 107798.
- Chelil, S., Oubanas, H., Henine, H., Gejadze, I., Olivier Malaterre, P., and Tournebize, J. (2022b). Improving the estimates of nitrate soil storage: the potential of variational data assimilation. *To be submitted*.
- Chelil, S., Oubanas, H., Henine, H., Gejadze, I., Olivier Malaterre, P., and Tournebize, J. (2022c). Variational Data Assimilation to Improve Subsurface Drainage Model Parameters. *Journal of Hydrology*, 128006.
- Chen, J., Huang, Y., and Caldwell, R. D. (2001). Best Management Practices for Minimizing Nitrate Leaching from Container-Grown Nurseries. *TheScientificWorldJOURNAL* **1**, 102320.
- Cho, K. H., Pachepsky, Y., Ligaray, M., Kwon, Y., and Kim, K. H. (2020). Data assimilation in surface water quality modeling: A review. *Water Research* **186**, 116307.
- Comifer (2011). Calcul de la fertilisation azotée-Guide méthodologique pour l'établissement des prescriptions locales. COMIFER Paris, France.
- Coron, L. (2013). Les modèles hydrologiques conceptuels sont-ils robustes face à un climat en évolution ? Diagnostic sur un échantillon de bassins versants français et australiens, Doctorat Hydrologie, Institut des Sciences et Industries du Vivant et de l'Environnement, AgroParisTech.
- Coron, L., Delaigue, O., Thirel, G., Dorchie, D., Perrin, C., and Michel, C. (2020). airGR: Suite of GR Hydrological Models for Precipitation-Runoff Modelling. R package version 1.7.0. Recherche Data Gouv.

- Davidson, N. C. (2014). How much wetland has the world lost? Long-term and recent trends in global wetland area. *Marine and Freshwater Research* **65**, 934-941.
- de Vries, W., Kros, J., Oenema, O., and de Klein, J. (2003). Uncertainties in the fate of nitrogen II: A quantitative assessment of the uncertainties in major nitrogen fluxes in the Netherlands. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* **66**, 71-102.
- Di, H., and Cameron, K. (2002). Nitrate leaching in temperate agroecosystems: sources, factors and mitigating strategies. *Nutrient cycling in agroecosystems* **64**, 237-256.
- Dinnes, D. L., Karlen, D. L., Jaynes, D. B., Kaspar, T. C., Hatfield, J. L., Colvin, T. S., and Cambardella, C. A. (2002). Nitrogen management strategies to reduce nitrate leaching in tile-drained Midwestern soils. *Agronomy journal* **94**, 153-171.
- Directive, C. (1991). Concerning the protection of waters against pollution caused by nitrates from agricultural sources. *Official Journal* **375**.
- Dressing, S. A. (2003). "National management measures for the control of nonpoint pollution from agriculture," US Environmental Protection Agency, Office of Water.
- Dunn, S. M. (1999). Imposing constraints on parameter values of a conceptual hydrological model using baseflow response. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* **3**, 271-284.
- Eckersten, H., Jansson, P., and Johnsson, H. (1996). SOILN model, user's guide,(Version 9.1). *Dep. of Soil Sciences, Swedish University of Agricultural Sciences, Uppsala, Sweden.*
- Eckhardt, K. (2005). How to construct recursive digital filters for baseflow separation. *Hydrological Processes* **19**, 507-515.
- Frey, S. K., Hwang, H.-T., Park, Y.-J., Hussain, S. I., Gottschall, N., Edwards, M., and Lapen, D. R. (2016). Dual permeability modeling of tile drain management influences on hydrologic and nutrient transport characteristics in macroporous soil. *Journal of Hydrology* **535**, 392-406.
- G. Arnold, J., N. Moriasi, D., W. Gassman, P., C. Abbaspour, K., J. White, M., Srinivasan, R., Santhi, C., D. Harmel, R., van Griensven, A., W. Van Liew, M., Kannan, N., and K. Jha, M. (2012). SWAT: Model Use, Calibration, and Validation. *Transactions of the ASABE* **55**, 1491-1508.
- Galloway, J. N., Aber, J. D., Erisman, J. W., Seitzinger, S. P., Howarth, R. W., Cowling, E. B., and Cosby, B. J. (2003). The Nitrogen Cascade. *BioScience* **53**, 341-356.
- Garnier, J., Billen, G., Tournebise, J., Barré, P., Mary, B., and Baudin, F. (2022). Storage or loss of soil active carbon in cropland soils: The effect of agricultural practices and hydrology. *Geoderma* **407**, 115538.
- Gauthier, P., Tanguay, M., Laroche, S., Pellerin, S., and Morneau, J. (2007). Extension of 3DVAR to 4DVAR: Implementation of 4DVAR at the Meteorological Service of Canada. *Monthly Weather Review* **135**, 2339-2354.
- Gerke, H. H., and Köhne, J. M. (2004). Dual-permeability modeling of preferential bromide leaching from a tile-drained glacial till agricultural field. *Journal of Hydrology* **289**, 239-257.
- Gerke, H. H., and Maximilian Köhne, J. (2004). Dual-permeability modeling of preferential bromide leaching from a tile-drained glacial till agricultural field. *Journal of Hydrology* **289**, 239-257.
- Gerke, H. H., and van Genuchten, M. T. (1993). A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media. *Water Resources Research* **29**, 305-319.
- Ghil, M., and Malanotte-Rizzoli, P. (1991). Data assimilation in meteorology and oceanography. In "Advances in geophysics", Vol. 33, pp. 141-266. Elsevier.
- Goutal, N., Goeury, C., Ata, R., Ricci, S., Nabil, E. M., Rochoux, M., Oubanas, H., Gejadze, I., and Malaterre, P.-O. (2018). Uncertainty Quantification for River Flow Simulation Applied to a Real Test Case: The Garonne Valley. pp. 169-187.

- Gowda, P., Mulla, D., Desmond, E., Ward, A., and Moriasi, D. (2012). ADAPT: Model use, calibration and validation. *Transactions of the ASABE (American Society of Agricultural and Biological Engineers)* **55**, 1345-1352.
- Gramlich, A., Stoll, S., Stamm, C., Walter, T., and Prasuhn, V. (2018). Effects of artificial land drainage on hydrology, nutrient and pesticide fluxes from agricultural fields – A review. *Agriculture, Ecosystems & Environment* **266**, 84-99.
- Guest, G., Kröbel, R., Grant, B., Smith, W., Sansoulet, J., Pattey, E., Desjardins, R., Jégo, G., Tremblay, N., and Tremblay, G. (2017). Model comparison of soil processes in eastern Canada using DayCent, DNDC and STICS. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* **109**, 211-232.
- Gupta, H. V., Kling, H., Yilmaz, K. K., and Martinez, G. F. (2009). Decomposition of the mean squared error and NSE performance criteria: Implications for improving hydrological modelling. *Journal of Hydrology* **377**, 80-91.
- Gurovich, L., and Oyarce, P. (2015). Modeling agricultural drainage hydraulic nets. *Irrig Drain Syst Eng* **4**, 149-158.
- Haas, M. B., Guse, B., and Fohrer, N. (2017). Assessing the impacts of Best Management Practices on nitrate pollution in an agricultural dominated lowland catchment considering environmental protection versus economic development. *Journal of Environmental Management* **196**, 347-364.
- Hagin, J., and Lowengart, A. (1996). Fertigation for minimizing environmental pollution by fertilizers. In "Fertilizers and Environment", pp. 23-25. Springer.
- Hascoet, L., and Pascual, V. (2013). The Tapenade Automatic Differentiation tool: principles, model, and specification. *ACM Transactions on Mathematical Software* **39**.
- Henine, H., Chaumont, C., Tournebize, J., Augeard, B., Kao, C., and Nedelec, Y. (2012). Le rôle des réseaux de drainage agricole dans le ralentissement dynamique des crues : interprétation des données de l'observatoire « Orgeval ». *Sciences Eaux & Territoires Cahier spécial*, 16-23.
- Henine, H., Jeantet, A., Chaumont, C., Chelil, S., Lauvernet, C., and Tournebize, J. (2022). Coupling of a subsurface drainage model with a soil reservoir model to simulate drainage discharge and drain flow start. *Agricultural Water Management* **262**, 107318.
- Her, Y., and Chaubey, I. (2015). Impact of the numbers of observations and calibration parameters on equifinality, model performance, and output and parameter uncertainty. *Hydrological Processes* **29**, 4220-4237.
- Hirel, B., Le Gouis, J., Ney, B., and Gallais, A. (2007). The challenge of improving nitrogen use efficiency in crop plants: towards a more central role for genetic variability and quantitative genetics within integrated approaches. *Journal of Experimental Botany* **58**, 2369-2387.
- Hunke, P., Mueller, E. N., Schröder, B., and Zeilhofer, P. (2015). The Brazilian Cerrado: assessment of water and soil degradation in catchments under intensive agricultural use. *Ecohydrology* **8**, 1154-1180.
- Iooss, B., and Lemaître, P. (2015). A review on global sensitivity analysis methods. In "Uncertainty management in simulation-optimization of complex systems", pp. 101-122. Springer.
- Jabro, J. D., Jabro, A. D., and Fales, S. L. (2012). Models Performance and Robustness for Simulating Drainage and Nitrate-Nitrogen Fluxes without Recalibration. *Soil Science Society of America Journal* **76**, 1957-1964.
- Jajarmizadeh, M., Harun, S., and Salarpour, M. (2012). A review on theoretical consideration and types of models in hydrology. *Journal of Environmental Science and Technology* **5**, 249-261.

- Jarvis, S. C. (1999). 1 - Nitrogen Dynamics in Natural and Agricultural Ecosystems. *In* "Managing Risks of Nitrates to Humans and the Environment" (W. S. Wilson, A. S. Ball and R. H. Hinton, eds.), pp. 2-20. Woodhead Publishing.
- Jay-Allemand, M., Javelle, P., Gejadze, I., Arnaud, P., Malaterre, P. O., Fine, J. A., and Organde, D. (2020). On the potential of variational calibration for a fully distributed hydrological model: application on a Mediterranean catchment. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* **24**, 5519-5538.
- Jean-Baptiste, N., Malaterre, P.-O., Dorée, C., and Sau, J. (2011). Data assimilation for real-time estimation of hydraulic states and unmeasured perturbations in a 1D hydrodynamic model. *Mathematics and Computers in Simulation* **81**, 2201-2214.
- Jeantet, A., Henine, H., Chaumont, C., Collet, L., Thirel, G., and Tournebize, J. (2021). Robustness of a parsimonious subsurface drainage model at the French national scale. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* **25**, 5447-5471.
- Jeantet, A., Thirel, G., Lemaitre-Basset, T., and Tournebize, J. (Submitted). Uncertainty Propagation in a Modeling Chain of Climate Change Impact for a Representative French Drainage Site. *Hydrological Sciences Journal*.
- Johnsson, H., Bergstrom, L., Jansson, P.-E., and Paustian, K. (1987). Simulated nitrogen dynamics and losses in a layered agricultural soil. *Agriculture, Ecosystems & Environment* **18**, 333-356.
- Jomaa, S., Jiang, S., Thraen, D., and Rode, M. (2016). Modelling the effect of different agricultural practices on stream nitrogen load in central Germany. *Energy, Sustainability and Society* **6**, 1-16.
- Jordan, T. E., Correll, D. L., and Weller, D. E. (1997). Relating nutrient discharges from watersheds to land use and streamflow variability. *Water Resources Research* **33**, 2579-2590.
- Justes, E., Beaudoin, N., Bertuzzi, P., Charles, R., Constantin, J., Durr, C., and Hermon, C. (2013). "Les cultures intermédiaires pour une production agricole durable," Quae.
- Justes, E., Beaudoin, N., Bertuzzi, P., Charles, R., Constantin, J., Durr, C., Hermon, C., Joannon, A., Le Bas, C., Mary, B., Mignolet, C., Montfort, F., Ruiz, L., Sarthou, J.-P., Souchere, V., and Tournebize, J. (2012). Réduire les fuites de nitrate au moyen de cultures intermédiaires : conséquences sur les bilans d'eau et d'azote, autres services écosystémiques.
- Kao, C. (2008). Une hydrologie des versants à nappes superficielles drainées: approches multi-processus et multi-échelles, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI.
- Kivi, M. S., Blakely, B., Masters, M., Bernacchi, C. J., Miguez, F. E., and Dokoohaki, H. (2022). Development of a data-assimilation system to forecast agricultural systems: A case study of constraining soil water and soil nitrogen dynamics in the APSIM model. *Science of The Total Environment* **820**, 153192.
- Kjær, J., Ernsten, V., Jacobsen, O. H., Hansen, N., de Jonge, L. W., and Olsen, P. (2011). Transport modes and pathways of the strongly sorbing pesticides glyphosate and pendimethalin through structured drained soils. *Chemosphere* **84**, 471-479.
- Kladivko, E. J., Van Scoyoc, G. E., Monke, E. J., Oates, K. M., and Pask, W. (1991). Pesticide and Nutrient Movement into Subsurface Tile Drains on a Silt Loam Soil in Indiana. *Journal of Environmental Quality* **20**, 264-270.
- Kobierska, F., Koch, U., Kasteel, R., Stamm, C., and Prasuhn, V. (2020). Plant protection product losses via tile drainage: A conceptual model and mitigation measures. *Agrarforschung Schweiz* **11**, 115-123.
- Kroeze, C., Aerts, R., van Breemen, N., Dam, D., Hofschreuder, P., Hoosbeek, M., De Klein, J., Hoek, K., Kros, H., Oene, H., Oenema, O., Tietema, A., Veeren, R., and Vries, W.

- (2003). Uncertainties in the Fate of Nitrogen I: An Overview of Sources of Uncertainty Illustrated with a Dutch Case Study. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* **66**, 43-69.
- Kuhlmann, H., Barraclough, P. B., and Weir, A. H. (1989). Utilization of mineral nitrogen in the subsoil by winter wheat. *Zeitschrift für Pflanzenernährung und Bodenkunde* **152**, 291-295.
- Kumazawa, K. (2002). Nitrogen fertilization and nitrate pollution in groundwater in Japan: Present status and measures for sustainable agriculture. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* **63**, 129-137.
- L. Campbell, K., S. Rogers, J., and R. Hensel, D. (1985). Drainage Water Quality from Potato Production. *Transactions of the ASAE* **28**, 1798-1801.
- Larsbo, M., Roulter, S., Stenemo, F., Kasteel, R., and Jarvis, N. (2005). An improved dual-permeability model of water flow and solute transport in the vadose zone. *Vadose Zone Journal* **4**, 398-406.
- Lasdon, L. S., Waren, A. D., Jain, A., and Ratner, M. (1978). Design and testing of a generalized reduced gradient code for nonlinear programming. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)* **4**, 34-50.
- Lassaletta, L., Billen, G., Grizzetti, B., Anglade, J., and Garnier, J. (2014). 50 year trends in nitrogen use efficiency of world cropping systems: the relationship between yield and nitrogen input to cropland. *Environmental Research Letters* **9**, 105011.
- Laghari, S. J., Wahocho, N. A., Laghari, G. M., HafeezLaghari, A., MustafaBhabhan, G., HussainTalpur, K., Bhutto, T. A., Wahocho, S. A., and Lashari, A. A. (2016). Role of nitrogen for plant growth and development: a review. *Advances in Environmental Biology* **10**, 209+.
- Lemaitre-Basset, T., Collet, L., Thirel, G., Parajka, J., Evin, G., and Hingray, B. (2021). Climate change impact and uncertainty analysis on hydrological extremes in a French Mediterranean catchment. *Hydrological Sciences Journal* **66**, 888-903.
- Lesaffre, B. (1988). Fonctionnement hydrologique et hydraulique du drainage souterrain des sols temporairement engorgés : débits de pointe et modèle SIDRA : extension des principes théoriques de Boussinesq et Guyon.
- Letournel, G., Pages, C., Seguin, L., Chaumont, C., and Tournebize, J. (2021). Biodiversité et services écosystémiques des zones tampons humides artificielles de Rampillon (Seine-et-Marne). *Sciences Eaux & Territoires*, 12-19.
- Li, C., Frolking, S., and Frolking, T. A. (1992a). A model of nitrous oxide evolution from soil driven by rainfall events: 1. Model structure and sensitivity. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* **97**, 9759-9776.
- Li, C., Frolking, S., and Frolking, T. A. (1992b). A model of nitrous oxide evolution from soil driven by rainfall events: 2. Model applications. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* **97**, 9777-9783.
- Lindström, G., Pers, C., Rosberg, J., Strömqvist, J., and Arheimer, B. (2010). Development and testing of the HYPE (Hydrological Predictions for the Environment) water quality model for different spatial scales. *Hydrology Research* **41**, 295-319.
- Liu, T., Bruins, R. J. F., and Heberling, M. T. (2018). Factors Influencing Farmers' Adoption of Best Management Practices: A Review and Synthesis. *Sustainability* **10**, 432.
- Liu, Y., Ao, C., Zeng, W., Kumar Srivastava, A., Gaiser, T., Wu, J., and Huang, J. (2021). Simulating water and salt transport in subsurface pipe drainage systems with HYDRUS-2D. *Journal of Hydrology* **592**, 125823.
- Liu, Y., Weerts, A., Clark, M., Hendricks Franssen, H.-J., Kumar, S., Moradkhani, H., Seo, D.-J., Schwanenberg, D., Smith, P., and Van Dijk, A. (2012). Advancing data assimilation in operational hydrologic forecasting: progresses, challenges, and emerging opportunities. *Hydrology and Earth System Sciences* **16**, 3863-3887.



- Lorre, E., Zimmer, D., Gérard, J., Dutertre, A., and Arlot, M.-P. (1994). Influence du drainage sur le ruissellement hivernal à l'échelle de la parcelle. *Journées de l'hydraulique* **23**, 87-93.
- Lu, C., and Tian, H. (2017). Global nitrogen and phosphorus fertilizer use for agriculture production in the past half century: shifted hot spots and nutrient imbalance. *Earth Syst. Sci. Data* **9**, 181-192.
- Ma, Z. C. (1991). Modélisation du transfert des nitrates : du bassin de recherche au grand bassin (exemples des bassins de melarchez et de la charente).
- Magesan, G., Scotter, D., and White, R. (1994). A transfer function approach to modeling the leaching of solutes to subsurface drains .I. Nonreactive solutes. *Soil Research* **32**, 69-83.
- Mander, Ü., Tournebize, J., Espenberg, M., Chaumont, C., Torga, R., Garnier, J., Muhel, M., Maddison, M., Lebrun, J. D., Uher, E., Remm, K., Pärn, J., and Soosaar, K. (2021). High denitrification potential but low nitrous oxide emission in a constructed wetland treating nitrate-polluted agricultural run-off. *Science of The Total Environment* **779**, 146614.
- Mantilla Morales, G. (1995). Modélisation des transferts de nitrates, confrontation des concepts, des données et des informations : application au bassin de la Charente, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- Mariotti, A. (1998). Nitrate: Un polluant de longue durée. *Pollution atmosphérique* **40**, 97-103.
- Mary, B., Beaudoin, N., Justes, E., and Machet, J. (1999). Calculation of nitrogen mineralization and leaching in fallow soil using a simple dynamic model. *European journal of soil science* **50**, 549-566.
- Matinzadeh, M. M. e. a. (2017). Development of an innovative integrated model for the simulation of nitrogen dynamics in farmlands with drainage systems using the system dynamics approach. *Ecological Modelling* **347**, 11-28.
- McLaughlin, D. (2002). An integrated approach to hydrologic data assimilation: interpolation, smoothing, and filtering. *Advances in Water Resources* **25**, 1275-1286.
- Meals, D. W., Dressing, S. A., and Davenport, T. E. (2010). Lag Time in Water Quality Response to Best Management Practices: A Review. *Journal of Environmental Quality* **39**, 85-96.
- Meyer, N., Bergez, J.-E., Constantin, J., and Justes, E. (2018). Cover crops reduce water drainage in temperate climates: A meta-analysis. *Agronomy for Sustainable Development* **39**, 3.
- Miller, K. S., and Geisseler, D. (2018). Temperature sensitivity of nitrogen mineralization in agricultural soils. *Biology and Fertility of Soils* **54**, 853-860.
- Mohtadullah, K. (1990). Interdisciplinary planning, data needs and evaluation for drainage projects. In "Land drainage - Drainage agricole : actes du 4ème séminaire international sur le drainage, Le Caire, EGY, 23-24 février 1990", pp. 127-140. Cemagref Editions, Antony.
- Molenat, J., Gascuel-Oudou, C., Ruiz, L., and Gruau, G. (2008). Role of water table dynamics on stream nitrate export and concentration in agricultural headwater catchment (France). *Journal of Hydrology* **348**, 363-378.
- Molina, J., and Richards, K. (1984). Simulation models of the nitrogen and carbon cycle in the soil-water-plant system, NCSWAP: Guide for the preparation of input data files and execution of NCSWAP. *Soil Ser* **116**.
- Moriasi, D., Gitau, M., Pai, N., and Daggupati, P. (2015). Hydrologic and Water Quality Models: Performance Measures and Evaluation Criteria. *Transactions of the ASABE (American Society of Agricultural and Biological Engineers)* **58**, 1763-1785.

- Motarjemi, S. K., Rosenbom, A. E., Iversen, B. V., and Plauborg, F. (2021). Important factors when simulating the water and nitrogen balance in a tile-drained agricultural field under long-term monitoring. *Science of The Total Environment* **787**, 147610.
- Muhammed, S. E., Coleman, K., Wu, L., Bell, V. A., Davies, J. A. C., Quinton, J. N., Carnell, E. J., Tomlinson, S. J., Dore, A. J., Dragosits, U., Naden, P. S., Glendining, M. J., Tipping, E., and Whitmore, A. P. (2018). Impact of two centuries of intensive agriculture on soil carbon, nitrogen and phosphorus cycling in the UK. *Science of The Total Environment* **634**, 1486-1504.
- Mylona, P., Pawlowski, K., and Bisseling, T. (1995). Symbiotic nitrogen fixation. *The Plant Cell* **7**, 869.
- Nash, J. E., and Sutcliffe, J. V. (1970). River flow forecasting through conceptual models part I—A discussion of principles. *Journal of hydrology* **10**, 282-290.
- Nkebiwe, P. M., Weinmann, M., Bar-Tal, A., and Müller, T. (2016). Fertilizer placement to improve crop nutrient acquisition and yield: A review and meta-analysis. *Field Crops Research* **196**, 389-401.
- Oosterbaan, R. J. (2019). "Models and software offered in website waterlog.info for agricultural land, soil, and water management."
- ORACLE (2013). GIS Oracle. Vol. 2022, pp. <https://gisoracle.inrae.fr/>.
- Oubanas, H., Gejadze, I., Malaterre, P.-O., Durand, M., Wei, R., Frasson, R. P. M., and Domeneghetti, A. (2018a). Discharge Estimation in Ungauged Basins Through Variational Data Assimilation: The Potential of the SWOT Mission. *Water Resources Research* **54**, 2405-2423.
- Oubanas, H., Gejadze, I., Malaterre, P.-O., and Mercier, F. (2018b). River discharge estimation from synthetic SWOT-type observations using variational data assimilation and the full Saint-Venant hydraulic model. *Journal of Hydrology* **559**, 638-647.
- Paris, T. (2004). Experimental study of solute transport in an artificially drained shallow water-table, ENGREF (AgroParisTech).
- Parton, W. J., Hartman, M., Ojima, D., and Schimel, D. (1998). DAYCENT and its land surface submodel: description and testing. *Global and planetary Change* **19**, 35-48.
- Payraudeau, S. (2002). Modélisation distribuée des flux d'azote sur des petits bassins versants méditerranéens, ENGREF (AgroParisTech).
- Perrin, C. (2000). Vers une amélioration d'un modèle global pluie-débit au travers d'une approche comparative.
- Perrin, C., Michel, C., and Andréassian, V. (2001). Does a large number of parameters enhance model performance? Comparative assessment of common catchment model structures on 429 catchments. *Journal of Hydrology* **242**, 275-301.
- Peters, N. E., and Meybeck, M. (2000). Water Quality Degradation Effects on Freshwater Availability: Impacts of Human Activities. *Water International* **25**, 185-193.
- Pianosi, F., Beven, K., Freer, J., Hall, J. W., Rougier, J., Stephenson, D. B., and Wagener, T. (2016). Sensitivity analysis of environmental models: A systematic review with practical workflow. *Environmental Modelling & Software* **79**, 214-232.
- Rabier, F., Järvinen, H., Klinker, E., Mahfouf, J.-F., and Simmons, A. (2000). The ECMWF operational implementation of four-dimensional variational assimilation. I: Experimental results with simplified physics. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **126**, 1143-1170.
- Radcliffe, D. E., and Simunek, J. (2018). "Soil physics with HYDRUS: Modeling and applications," CRC press.
- Randall, G. W., and Goss, M. J. (2008). Chapter 6 - Nitrate Losses to Surface Water Through Subsurface, Tile Drainage. In "Nitrogen in the Environment (Second Edition)" (J. L. Hatfield and R. F. Follett, eds.), pp. 145-175. Academic Press, San Diego.

- Razavi, S., Jakeman, A., Saltelli, A., Prieur, C., Iooss, B., Borgonovo, E., Plischke, E., Lo Piano, S., Iwanaga, T., Becker, W., Tarantola, S., Guillaume, J. H. A., Jakeman, J., Gupta, H., Melillo, N., Rabitti, G., Chabridon, V., Duan, Q., Sun, X., Smith, S., Sheikholeslami, R., Hosseini, N., Asadzadeh, M., Puy, A., Kucherenko, S., and Maier, H. R. (2021). The Future of Sensitivity Analysis: An essential discipline for systems modeling and policy support. *Environmental Modelling & Software* **137**, 104954.
- Refsgaard, J., Thorsen, M., Jensen, J. B., Kleeschulte, S., and Hansen, S. (1999). Large scale modelling of groundwater contamination from nitrate leaching. *Journal of hydrology* **221**, 117-140.
- Refsgaard, J. C., and Storm, B. (1996). Construction, Calibration And Validation of Hydrological Models. In "Distributed Hydrological Modelling" (M. B. Abbott and J. C. Refsgaard, eds.), pp. 41-54. Springer Netherlands, Dordrecht.
- Reichle, R. H. (2008). Data assimilation methods in the Earth sciences. *Advances in Water Resources* **31**, 1411-1418.
- Reichle, R. H., McLaughlin, D. B., and Entekhabi, D. (2002). Hydrologic data assimilation with the ensemble Kalman filter. *Monthly Weather Review* **130**, 103-114.
- Ren, L., Ma, J., and Zhang, R. (2003). Estimating nitrate leaching with a transfer function model incorporating net mineralization and uptake of nitrogen. *J Environ Qual* **32**, 1455-63.
- Richardson, A. D., and Siccama, T. G. (2000). ARE SOILS LIKE SPONGES? *JAWRA Journal of the American Water Resources Association* **36**, 913-918.
- Rs, B. (2005). A review of techniques for analysing baseflow from stream hydrographs.
- Ruidisch, M., Bartsch, S., Kettering, J., Huwe, B., and Frei, S. (2013). The effect of fertilizer best management practices on nitrate leaching in a plastic mulched ridge cultivation system. *Agriculture, Ecosystems & Environment* **169**, 21-32.
- Ruiz, L., Abiven, S., Martin, C., Durand, P., Beaujouan, V., and Molenat, J. (2002). Effect on nitrate concentration in stream water of agricultural practices in small catchments in Brittany: II. Temporal variations and mixing processes. *Hydrology and Earth System Sciences* **6**.
- Schilling, K., and Zhang, Y.-K. (2004). Baseflow contribution to nitrate-nitrogen export from a large, agricultural watershed, USA. *Journal of Hydrology* **295**, 305-316.
- Simunek, J., Sejna, M., and Van Genuchten, M. T. (1999). "The HYDRUS-2D software package for simulating the two-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media." Technical report. International Groundwater Modelling Center - Colorado School of Mines, USA.
- Šimunek, J., and van Genuchten, M. T. (2008). Modeling nonequilibrium flow and transport processes using HYDRUS. *Vadose Zone Journal* **7**, 782-797.
- Skaggs, R. W., Brevé, M. A., and Gilliam, J. W. (1994). Hydrologic and water quality impacts of agricultural drainage\*. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology* **24**, 1-32.
- Skaggs, R. W., Youssef, M., and Chescheir, G. M. (2012). DRAINMOD: model use, calibration, and validation. *Transactions of the ASABE* **55**, 1509-1522.
- Smil, V. (1991). Population growth and nitrogen: an exploration of a critical existential link. *Population and Development Review*, 569-601.
- Smil, V. (2004). "Enriching the earth: Fritz Haber, Carl Bosch, and the transformation of world food production," MIT press.
- Smith, W., Grant, B., Qi, Z., He, W., VanderZaag, A., Drury, C. F., and Helmers, M. (2020). Development of the DNDC model to improve soil hydrology and incorporate mechanistic tile drainage: A comparative analysis with RZWQM2. *Environmental Modelling & Software* **123**, 104577.

- Sobol, I. M. (1993). Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models. *Mathematical modelling and computational experiments* **1**, 407-414.
- Spahr, N. E., Dubrovsky, N. M., Gronberg, J. M., Franke, O., and Wolock, D. M. (2010). "Nitrate loads and concentrations in surface-water base flow and shallow groundwater for selected basins in the United States, water years 1990-2006." U. S. Geological Survey.
- Stanford, G., Frere, M., and Schwaninger, D. (1973). Temperature coefficient of soil nitrogen mineralization. *Soil Science* **115**, 321-323.
- Stenger, R., Priesack, E., and Beese, F. (1998). Distribution of inorganic nitrogen in agricultural soils at different dates and scales. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* **50**, 291-297.
- Stuart, M. E., Chilton, P. J., Kinniburgh, D. G., and Cooper, D. M. (2007). Screening for long-term trends in groundwater nitrate monitoring data. *Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology* **40**, 361-376.
- Surdyk, N., Gutierrez, A., Baran, N., and Thiéry, D. (2021). A lumped model to simulate nitrate concentration evolution in groundwater at catchment scale. *Journal of Hydrology* **596**, 125696.
- Tallec, G. (2012). 1962-2012 : cinquante ans d'observations, un bien précieux pour la recherche et les services opérationnels. *Sciences Eaux & Territoires Cahier spécial*, 2-9.
- Tang, T., Strokal, M., van Vliet, M. T. H., Seuntjens, P., Burek, P., Kroeze, C., Langan, S., and Wada, Y. (2019). Bridging global, basin and local-scale water quality modeling towards enhancing water quality management worldwide. *Current Opinion in Environmental Sustainability* **36**, 39-48.
- Tao, Y., Li, N., Wang, S., Chen, H., Guan, X., and Ji, M. (2021). Simulation study on performance of nitrogen loss of an improved subsurface drainage system for one-time drainage using HYDRUS-2D. *Agricultural Water Management* **246**, 106698.
- Thorsen, M., Refsgaard, J. C., Hansen, S., Pebesma, E., Jensen, J. B., and Kleeschulte, S. (2001). Assessment of uncertainty in simulation of nitrate leaching to aquifers at catchment scale. *Journal of Hydrology* **242**, 210-227.
- Tournebize, J., Arlot, M.-P., Billy, C., Birgand, F., Gillet, J.-P., and Dutertre, A. (2008). Quantification et maîtrise des flux de nitrates: de la parcelle drainée au bassin versant. *Ingénierie Eau Agriculture et Territoires. Special Issue*, 5-25.
- Tournebize, J., Chaumont, C., Fesneau, C., Guenne, A., Vincent, B., Garnier, J., and Mander, Ü. (2015). Long-term nitrate removal in a buffering pond-reservoir system receiving water from an agricultural drained catchment. *Ecological Engineering* **80**, 32-45.
- Tournebize, J., Chaumont, C., Henine, H., Vincent, B., Kchouk, S., and Mander, U. (2017). Réduire les flux de pesticides et nitrate par une zone tampon humide artificielle : Site pilote de Rampillon.
- Tournebize, J., Gramaglia, C., Birmant, F., Bouarfa, S., Chaumont, C., and Vincent, B. (2012). Co-design of constructed wetlands to mitigate pesticide pollution in a drained catch-basin: a solution to improve groundwater quality. *Irrigation and Drainage* **61**, 75-86.
- Tournebize, J., Kao, C., Nikolic, N., and Zimmer, D. (2004). Adaptation of the STICS model to subsurface drained soils. *Agronomie* **24**, 305-313.
- Tournebize, J., Passeport, E., Chaumont, C., Fesneau, C., Guenne, A., and Vincent, B. (2013). Pesticide de-contamination of surface waters as a wetland ecosystem service in agricultural landscapes. *Ecological Engineering* **56**, 51-59.
- Utke, J., Naumann, U., Fagan, M., Tallent, N., Strout, M., Heimbach, P., Hill, C., and Wunsch, C. (2008). OpenAD/F: A modular open-source tool for automatic differentiation of Fortran codes. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)* **34**, 1-36.

- Valayamkunnath, P., Gochis, D. J., Chen, F., Barlage, M., and Franz, K. J. (2022). Modeling the Hydrologic Influence of Subsurface Tile Drainage Using the National Water Model. *Water Resources Research* **58**, e2021WR031242.
- Valipour, M. (2012). Effect of Drainage Parameters Change on Amount of Drain Discharge in Subsurface Drainage Systems. *IOSR Journal of Agriculture and Veterinary Science (IOSR-JAVS)* **1**, 10-18.
- Vandenbergh, C., De Toffoli, M., Bachelart, F., Imbrecht, O., Lambert, R., and Marcoen, J. M. (2013). Contrôle de l'azote potentiellement lessivable dans le sol en début de période de lixiviation. Établissement des valeurs de référence. *Biotechnologie, agronomie, société et environnement* **17**, 231-236.
- Vandenbergh, C., Marcoen, J. M., Sohier, C., Degre, A., Hendrickx, C., and Paulus, F. (2011). Monitoring networks and modelling systems for assessing effectiveness of the EU Nitrates Directive Action Programmes: Approach by the Walloon Region (Belgium). pp. 119.
- Varvaris, I., Pittaki-Chrysodonta, Z., Duus Børgesen, C., and Iversen, B. V. (2021). Parameterization of two-dimensional approaches in HYDRUS-2D: Part 2. Solute transport at the field and column scale. *Soil Science Society of America Journal* **85**, 1496-1518.
- Velstra, J., Groen, J., and De Jong, K. (2011). Observations Of Salinity Patterns In Shallow Groundwater And Drainage Water From Agricultural Land In The Northern Part Of The Netherlands. *Irrigation and Drainage* **60**, 51-58.
- Vidal, J.-P., Martin, E., Franchistéguy, L., Baillon, M., and Soubeyroux, J.-M. (2010). A 50-year high-resolution atmospheric reanalysis over France with the Safran system. *International Journal of Climatology* **30**, 1627-1644.
- Vincent, B. (2020). Principes techniques et chiffres du drainage agricole. De la tuyautique à l'hydro-diplomatie. *Sciences Eaux Territoires*, 8-15.
- White, R. E. (1987). A transfer function model for the prediction of nitrate leaching under field conditions. *Journal of Hydrology* **92**, 207-222.
- White, R. E., Wellings, S. R., and Bell, J. P. (1983). Seasonal variations in nitrate leaching in structured clay soils under mixed land use. *Agricultural Water Management* **7**, 391-410.
- Willkommen, S., Pfannerstill, M., Ulrich, U., Guse, B., and Fohrer, N. (2019). How weather conditions and physico-chemical properties control the leaching of flufenacet, diflufenican, and pendimethalin in a tile-drained landscape. *Agriculture, Ecosystems & Environment* **278**, 107-116.
- Xiong, Z. Q., Freney, J. R., Mosier, A. R., Zhu, Z. L., Lee, Y., and Yagi, K. (2008). Impacts of population growth, changing food preferences and agricultural practices on the nitrogen cycle in East Asia. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* **80**, 189-198.
- Youssef, M., and al, e. (2005). The Nitrogen Simulation Model, Drainmod-N II. *Transactions of the ASAE* **48**, 611-626.
- Youssef, M., Skaggs, R., Chescheir, G., and Gilliam, J. (2005). The nitrogen simulation model, DRAINMOD-N II. *Transactions of the ASAE* **48**, 611-626.
- Zeng, S., Jacobs, D. F., Sloan, J. L., Xue, L., Li, Y., and Chu, S. (2013). Split fertilizer application affects growth, biomass allocation, and fertilizer uptake efficiency of hybrid Eucalyptus. *New Forests* **44**, 703-718.
- Zhang, X. Y., Trame, M. N., Lesko, L. J., and Schmidt, S. (2015). Sobol Sensitivity Analysis: A Tool to Guide the Development and Evaluation of Systems Pharmacology Models. *CPT: pharmacometrics & systems pharmacology* **4**, 69-79.
- Zhou, M., and Butterbach-Bahl, K. (2014). Assessment of nitrate leaching loss on a yield-scaled basis from maize and wheat cropping systems. *Plant and Soil* **374**, 977-991.

- Zhu, C., Byrd, R. H., Lu, P., and Nocedal, J. (1997). Algorithm 778: L-BFGS-B: Fortran subroutines for large-scale bound-constrained optimization. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)* **23**, 550-560.
- Zhu, Z., Xiong, Z., and Xing, G. (2005). Impacts of population growth and economic development on the nitrogen cycle in Asia. *Science in China Series C: Life Sciences* **48**, 729-737.
- Zimmer, D. (1988). Transferts hydriques en sols drainés par tuyaux enterrés : compréhension des débits de pointe et essai de typologie des schémas d'écoulement.

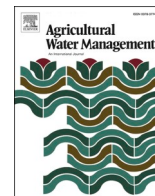
## Annexe

---

L'annexe présente l'article scientifique intitulé « Coupling of a subsurface drainage model with a soil reservoir model to simulate drainage discharge and drain flow start » dont je suis co-auteur. L'article a été accepté par la revue « Agricultural Water Management » le 31 octobre 2021 et publié dans sa version définitive à la date du 31 mars 2022.

Le document présente la version définitive du modèle de drainage SIDRA-RU. Cela inclut :

- Une description détaillée du fonctionnement du modèle,
- Une analyse de sensibilité pour déterminer l'influence des paramètres d'entrée du modèle sur le débit de drainage et la date de démarrage de la saison de drainage intense,
- Une évaluation des performances du modèle sur les données de la Jaillière, une parcelle agricole artificiellement drainée située en France et totalisant une superficie d'un hectare.



## Coupling of a subsurface drainage model with a soil reservoir model to simulate drainage discharge and drain flow start

Hocine Henine<sup>a,\*</sup>, Alexis Jeantet<sup>a</sup>, Cédric Chaumont<sup>a</sup>, Samy Chelil<sup>a</sup>, Claire Lauvernet<sup>b</sup>, Julien Tournebize<sup>a</sup>

<sup>a</sup> University of Paris-Saclay, INRAE, UR HYCAR, Jouy-en-Josas, Antony, France

<sup>b</sup> INRAE, UR RiverLy, Lyon, France

### ARTICLE INFO

Handling Editor – Xiyang Zhang

#### Keywords:

Subsurface drainage  
Modeling  
Drain flow start  
Tile-drained field

### ABSTRACT

The environmental impact of subsurface drainage and agricultural activities has been widely studied in the literature. Agricultural subsurface drainage modifies the hydrological behavior and accelerates the transfer of pollutants of agricultural origin into surface water during the drain flow period, which is often limited to winter. The main objective of this study is to present a modeling approach allowing an accurate modeling of subsurface drainage discharge and prediction of drain flow start times, by integrating a new conceptual soil reservoir, managing the water flow in the unsaturated zone, to the SIDRA model. A comparison of the model results with field measurements of drainage discharge at the “La Jaillière” site (France) shows that such a model can efficiently simulate drainage discharge (KGE values >0.75) and predict, with good accuracy, the drain flow start time (with a median value of 5 days and a standard deviation of 10 days). The split simple test conducted for the model calibration and validation shows that the model is temporally robust. A sensitivity analysis conducted using the Sobol method on the five model parameters reveals that the drainage discharge simulation is mainly sensitive to the hydraulic conductivity and drainable porosity parameters. On the other hand, the date delimiting drain flow start is sensitive to the soil reservoir parameters. The model’s ability to accurately predict the start of drain flow serves to avoid the application of farm inputs (pesticides or fertilizers) during this critical period in order to limit their transfer to surface waters.

## 1. Introduction

Land improvements contribute to agricultural intensification, which in turn leads to greater crop production from the same parcel. Among such improvements, subsurface drainage (SD) is practiced to remove the temporary excess water from the root zone for purposes of: better aeration, higher temperatures and enhanced workability of the soil in humid regions. In arid and semi-arid regions, the primary function of SD is to prevent irrigation-induced waterlogging and soil salinization (Ritzema, 2016). In Europe, SD is mainly devoted to preventing waterlogging in specific hydromorphic soils; this practice is principally employed in Northern Europe, on over 50% of arable land (from the Netherlands to Finland), vs. approximately 10–20% for other European countries. In France, out of the 27 million hectares of arable land, more than 10% are subsurface drained (AGRESTE, 2010; Vincent, 2020). Subsurface drainage was established in France later than in other European countries, i.e. during the 1980’s; it was promoted by European

and national-level subsidies until 1992, when current water laws began limiting the extent of additional SD practices.

Agricultural SD introduces significant modifications to the hydrological behavior and results in nutrient and fertilizer losses from farmland to surface water (Blann et al., 2009; Gramlich et al., 2018). During the drainage period, the application of mobile pesticides or fertilizers before a heavy rainfall increases their losses toward the SD outlet and the water surface (Boithias et al., 2014; Nolan et al., 2008). The temporary functioning of SD systems, mainly during the wet season, allows adapting the timing of when to apply farm inputs to reduce losses, e.g. increasing the interval between an application and the first drain flow of the drainage season (Brown and van Beinum, 2009; Trajanov et al., 2015; Wilson et al., 2020). An accurate prediction of this first drain flow is key to optimizing the timing of farm input application, thereby decreasing the risk of their transfer toward the water surface (Jones et al., 2000; Lewan et al., 2009; Nolan et al., 2008; Trajanov et al., 2015; Willkommen et al., 2019).

\* Corresponding author.

E-mail address: [Hocine.henine@inrae.fr](mailto:Hocine.henine@inrae.fr) (H. Henine).

<https://doi.org/10.1016/j.agwat.2021.107318>

Received 12 May 2021; Received in revised form 29 October 2021; Accepted 31 October 2021

Available online 18 November 2021

0378-3774/© 2021 Elsevier B.V. All rights reserved.



The behavior of SD systems can be simulated by means of a physical or hydraulic approach. The physical approach is based on the numerical resolution of a physical law, such as the 3D Richards equation. Several physically-based models propose specific conditions for considering the presence of SD, e.g. in HYDRUS, SOIL, CATHY, DDM and 2D-DPERM (Al Jabri and Youngs, 2015; Boivin et al., 2006; Dusek and Vogel, 2014; Gårdenäs et al., 2006; Gatel et al., 2019; Gerke et al., 2013; Mehdinejadani and Fathi, 2020; Shokri and Bardsley, 2016). The hydraulic-based approach merely considers the flow in a saturated zone and proposes a simplified equation, derived from both the Boussinesq equation (1904) and Forchheimer's hypothesis (Guyon, 1963; Henine et al., 2014; Van Schilfgaarde, 1963), to calculate drainage discharge as a function of water table height at mid-drain. The Hooghoudt drainage equation (Hooghoudt, 1940), which relates steady-state drainage discharge to the water table height at mid-drain, is the most widely used approach in SD modeling. When the water table rises to the soil surface for relatively long periods, drainage discharge is computed using the Kirkham equation (Kirkham, 1949) for ponded water. The approach proposed by Moriasi et al. (2013) couples Kirkham's simplified equations with the Hooghoudt equation (Hooghoudt, 1940; Kirkham, 1949) to examine long time series of subsurface drained experimental facilities; this approach offers the advantage of simulating both small and peak flow discharges. The Kirkham and Hooghoudt equations were integrated into the DRAINMOD model (Skaggs, 1980). The models MACRO (Jarvis and Larsbo, 2012), SWAP (Kroes et al., 2008) and many others adopt different equations (such as Hooghoudt, Kirkham's and Ernst equations) or use seepage potential theory by considering the drain as a sink term to take into account subsurface drainage (Qi and Qi, 2016; Youngs, 1980). Guyon (1963) and Lesaffre and Zimmer (1987) developed the SIDRA (*Simulation of DRAINage*) model to simulate drainage discharge during the drainage season, based on the numerical integration of Boussinesq's equation between the drain and mid-drain. In relying on this same Boussinesq equation, Stillman et al. (2006) proposed another semi-analytical equation to simulate drainage discharge. These various simplified approaches have been incorporated into several distributed hydrological and GIS-based models for the purpose of integrating the SD function, e.g. SWAT (Moriasi et al., 2012), HYPE (Lindstrom et al., 2010) and ADAPT (Gowda et al., 2012).

The models derived from the Boussinesq equation are well adapted to simulate the hydrological behavior of SD, including peak flow prediction (Lesaffre and Zimmer, 1988). However, they become less suitable once the goal turns to predicting the environmental impact of agricultural SD. It is necessary to take into account the hydrodynamic behavior of the unsaturated zone as well as the plant growth impact on water table recharge and, hence, on drainage discharge. In this context, a coupling of the behavior in both saturated and unsaturated zones within a simple hydraulic approach for SD behavior modeling would offer a better understanding of the underlying environmental impacts. A coupled agronomic-hydrological model, namely STICS-SIDRA (Tournebize et al., 2004), was developed to manage the saturated and unsaturated zones; however, this crop model requires numerous parameters only available in certain fields of experimental research.

This paper integrates a new conceptual soil reservoir module into the hydraulic-based SIDRA model in order to predict both drainage discharge and drain flow starts. The conceptual module simulates water transfer in the unsaturated zone and calculates the recharge of the perched water table, which then serves as SIDRA input data. To simplify the model as much as possible, this conceptualization needs to be easily implemented and should improve both the prediction of drainage discharge and drain flow start every hydrological year.

The proposed model has been calibrated and validated using the dataset collected from two experimental drained plots located at the "La Jaillière" site (western France). The model's performance evaluation criterion is based on a comparison between simulated and observed drainage discharge, as well as on the drainage season start date. A global sensitivity analysis has also been conducted to study the influence of

input parameters on model performance.

## 2. Experimental set-up

### 2.1. Experimental study sites

The "La Jaillière" experimental site (Fig. 1) is located in western France's Loire-Atlantique Department (47°27' N, 0°57' W); it has been managed by the Arvalis Institute (French agricultural institute) since 1987. The experiments and research work carried out here focus on several study objectives, in particular to achieve satisfactory control over both water quality and quantity of the SD system. Several experiments have been ongoing since its inception, thus providing a most valuable dataset covering nearly 30 years.

The climate in the study area is oceanic with a mean annual rainfall of 709 mm; the mean annual temperature is approximately 11 °C. The mean potential evapotranspiration (PET) reaches 738 mm a year. The period of water budget deficit begins in April and continues until the end of September. Subsequent to this period, the excess net rainfall allows for a progressive saturation of the soil and the formation of a temporary perched water table, at which point the drain flow starts.

The soil at the La Jaillière site is a brown, hydromorphic stagnic luvisol developed on a low permeability, altered schist formation (Dairon et al., 2017). The soil surface layer (<30 cm deep) consists of a sandy loam (16–22% clay), while the underlying layer, of variable thickness (from 30 to 90 cm), is richer in clay (>30%, clayey-silty texture). The depth of the altered schist formation is highly variable within the studied plots, ranging from 0.6 to 1.2 m, and represents a natural obstacle to water infiltration. This impervious layer is responsible for temporary waterlogging through the formation of a perched water table. For each experimental plot (Table 1), the water holding capacity (see Section 3.1) was estimated from the textural soil analysis at a 0.8-m soil profile, by use of Rawls' linear regression equation (Rawls and Brakensiek, 1982).

To prevent soil waterlogging and improve crop growth during winter, an SD network was installed in the 1980's (Table 1). Each experimental drained plot has been equipped with an individual drainage network (10 m drain spacing, installed at a depth of 0.8–1 m), connected to a non-perforated collector extending to the measurement chamber. For each field, the drainage discharge and surface runoff are collected and measured separately. The surface runoff is collected using traps around each plot (Fig. 1). The flow discharge is then measured hourly at each collector outlet using a V-notch weir. The water level upstream of the weir, measured with an automatic pressure probe, is proportional to the flow discharge.

Meteorological data are available at two stations (Trajanov et al., 2018). The former station from 1982 is located 1.4 km from the fields, while the new one (in operation since 2006) is located at the experimental site.

### 2.2. Observation data

For purposes of model assessment, the dataset collected for experimental plots T03 (1.04 ha) and T04 (1.08 ha) is used to validate SIDRA-RU model. These datasets comprise hourly subsurface drainage discharge (from 1994 to 2010) and surface runoff (from 1994 to 2004).

Since the meteorological data recorded at the study site contain many gaps, we have used the rainfall and Potential EvapoTranspiration (PET) data from the SAFRAN meteorological reanalysis produced by the Météo-France Agency (Vidal et al., 2010), defined on 8 km × 8 km grids at the national scale. While these PET data can be considered as homogeneous on the 8 km × 8 km SAFRAN grid, the rainfall data should display more local variation, which can exert a rather significant impact on modeling accuracy of the two studied plots.

One of the mitigation solutions of pesticides losses from subsurface drained fields is to increase the time interval (of several days) between

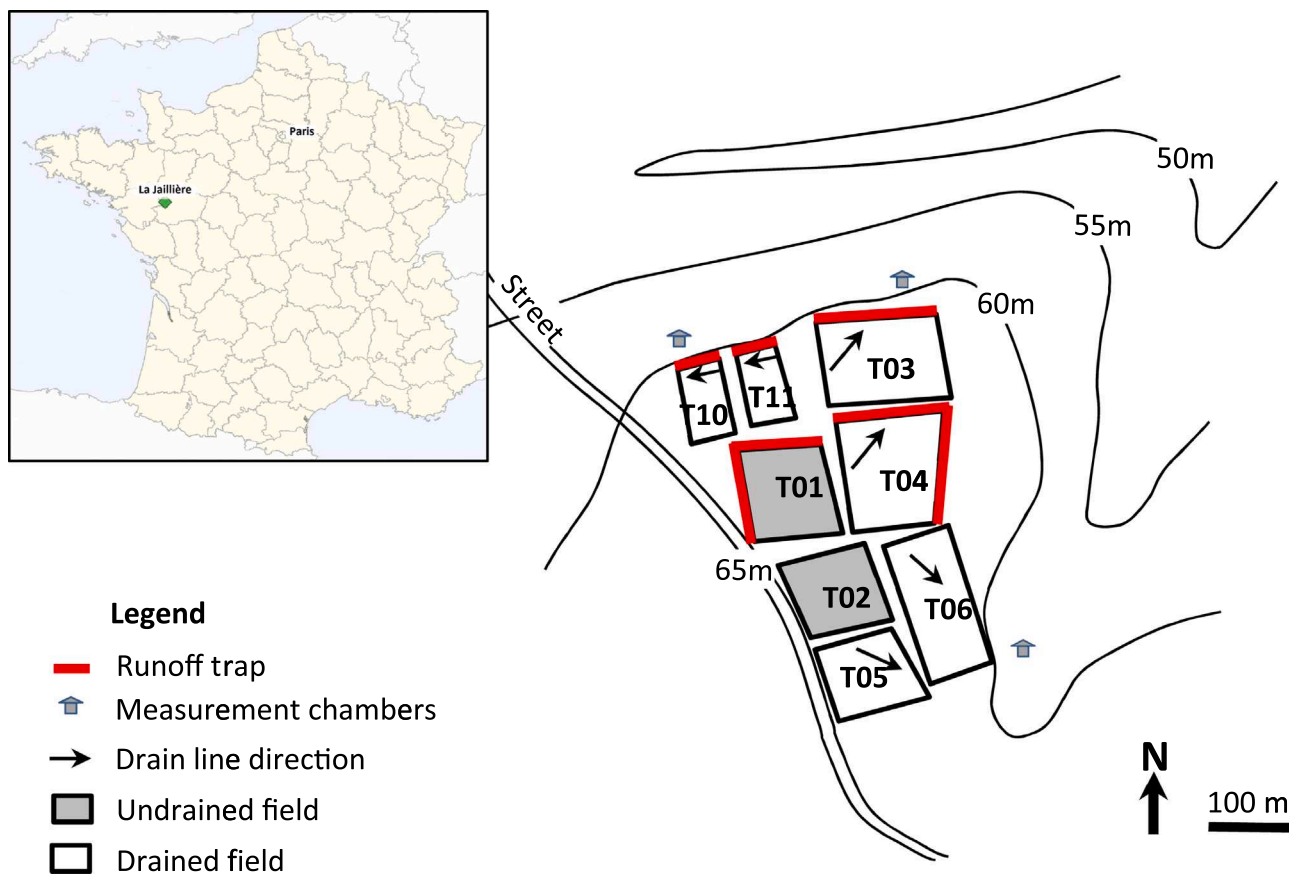


Fig. 1. The "La Jaillière" experimental study site and its general location (Arvalis, Maine-et-Loire, France).

Table 1

Characteristics of the experimental plot at the La Jaillière site: drainage design (depth and drain spacing), surface area, and Water Holding Capacity (WHC) calculated at a 0.8-m soil profile.

Plot	Drain depth (m)	Drain spacing (m)	Surface area (ha)	WHC (mm)	Type of collected water
T01	-	-	0.83	97	Surface runoff
T02	-	-	0.90	96	-
T03	0.8–1.0	10	1.04	84	Surface runoff / Drainage
T04	0.8–1.0	10	1.08	104	Surface runoff / Drainage
T06	0.8–1.0	10	1.01	103	Drainage
T10	0.8–1.0	10	0.42	95	Surface runoff / Drainage
T11	0.8–1.0	10	0.42	99	Surface runoff / Drainage

their application and first drain flow (Brown and van Beinum, 2009; Trajanov et al., 2015). Thus, the SIDRA-RU model needs to be efficient and capable of accurately predict drainage discharge and drain flow start. This accuracy depends on the method or criterion used to set the drain flow start date. At the beginning of the drainage season, drain flow is often low and quick; also, several days may pass without any drain flow at all. This specificity is difficult to reproduce with acceptable accuracy by the models. To overcome the low flows that fail to indicate the actual start of the drainage season, we have introduced herein a new method using two static thresholds conditions: (1) the calculated cumulative drainage discharge must be greater than the initial threshold; and (2) the additional cumulative drainage discharge within the 5 subsequent days must be greater than the second threshold. Based on the experimental dataset, the first and second thresholds are set to 2 and

2.5 mm, respectively.

From the drainage discharge measurement, we defined the drain flow start dates for each season. The yearly cumulative values of meteorological data, drainage discharge and surface runoff plus the drain flow start dates used in this study are listed in Table 2.

Table 2 shows that the yearly drainage discharge correlates with the yearly rainfall. The PET shows a small inter-annual variation (with a mean value of 690 and a standard deviation of 40 mm). In the wet period (autumn and winters seasons), the PET demand is generally satisfied and the excess of rainfall (P-PET) causes drainage discharge (Q<sub>drain</sub>) and surface runoff. Assuming that deep infiltration under the drainage network is negligible during the drain flow period, the average evapotranspiration (AET, computed as Rainfall - Q<sub>drain</sub> - Surface Runoff) accounts for 86% of PET. However, in the dry period, the PET demand is poorly satisfied and there occurs neither drain flow nor surface runoff. The yearly average AET accounts for 67% of PET. The rainfall and drainage discharge dataset displays high hydrological variability with respect to both dry (e.g. season 2004–05) and wet seasons (e.g. 2000–01). Analysis of Table 2 suggests that the start of drainage season is highly variable from one season to another. In average, the drainage season starts in mid-November, however, it can start early (in September) or very late (in January). The drainage season 2004–2005 started later in January 5 and presented a low cumulative drainage discharge (of 10 mm). Drain flow often starts earlier on plot T03 than on T04, despite their similarity during the intense drainage season. The low WHC value for plot T03 (Table 1) allows filling the soil profile and generating a water table flow toward drains earlier on the this plot, as compared to T04. From the data observed in Table 2, surface runoff accounts for 12% and 10% of the total outflow of plots T04 and T03, respectively.

**Table 2**

Yearly cumulative values of meteorological data (PET, rainfall), drainage discharge (Q<sub>drain</sub>) and surface runoff, plus drain flow start dates on Plots T03 and T04. Values between parentheses (\*) represent the cumulative rainfall and PET over drain flow periods (Q<sub>drain</sub> > 0).

Drainage seasons	PET (*) (mm)	Rainfall (*) (mm)	T03 plot			T04 plot		
			Q <sub>drain</sub> (mm)	Runoff (mm)	Drain flow start	Q <sub>drain</sub> (mm)	Runoff (mm)	Drain flow start
1994–1995	723 (586)	947 (787)	484	64	24-Oct	500	–	23-Sept
1995–1996	763 (334)	586 (414)	134	13	22-Dec	109	10	27-Dec
1996–1997	727 (117)	606 (286)	189	16	28-Nov	165	15	29-Nov
1997–1998	675 (162)	709 (399)	221	15	11-Dec	193	22	–
1998–1999	706 (342)	779 (610)	280	34	19-Oct	290	37	24-Nov
1999–2000	634(288)	945 (764)	438	34	19-Sept	382	57	19-Sept
2000–2001	644 (292)	1128 (990)	519	76	11-Oct	512	113	16-Oct
2001–2002	631 (110)	614 (260)	156	39	18-Oct	144	14	29-Dec
2002–2003	649 (164)	887 (566)	398	46	4-Sept	328	28	2-Nov
2003–2004	681 (246)	629 (427)	247	–	14-Nov	237	29	16-Nov
2004–2005	704 (66)	506 (85)	24	–	5-Jan	10	–	20-Jan
2005–2006	739 (131)	594 (298)	122	–	4-Jan	121	–	4-Dec
2006–2007	677 (352)	1029 (778)	278	–	19-Oct	274	–	21-Oct
2007–2008	691 (279)	682 (464)	231	–	27-Nov	174	–	5-Jan
2008–2009	668 (247)	646 (353)	133	–	10-Nov	113	–	9-Dec
2009–2010	735 (231)	650 (423)	181	–	28-Nov	226	–	28-Nov
<b>Mean</b>	<b>690 (247)</b>	<b>746 (494)</b>	<b>252</b>	<b>37</b>	<b>10-Nov</b>	<b>236</b>	<b>36</b>	<b>23-Nov</b>
<b>Standard deviation</b>	<b>40 (127)</b>	<b>184 (238)</b>	<b>141</b>	<b>22</b>	<b>–</b>	<b>140</b>	<b>32</b>	<b>–</b>

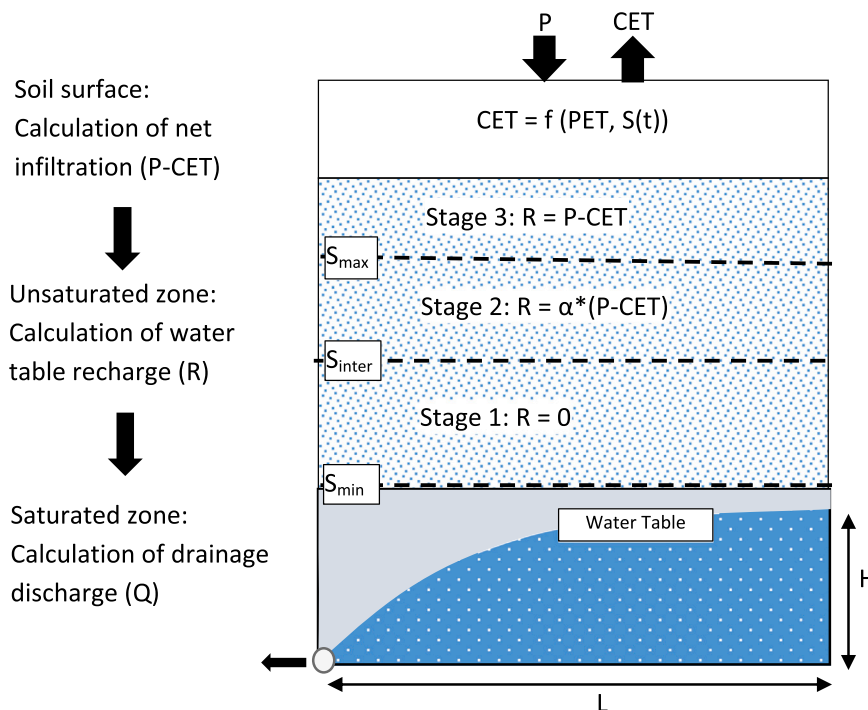
**3. Model description**

Drain flow occurs when the perched water table rises above the drains. The SIDRA model simulates drainage discharge during the soil profile saturation period, defined as the Intensive Drainage Season (IDS) by Lesaffre and Zimmer (1988). The new SIDRA-RU model presented herein allows SIDRA to simulate SD discharges and hydrological behavior at the plot scale during a full hydrological year and extending for several subsequent years. The proposed model has been based on three coupled modules (Fig. 2) managing the flow paths: in the soil surface, in the unsaturated zone, and in the water table temporally perched above the drains. These three modules, integrated into the current version of SIDRA-RU, are as follows:

1. Module 1: Estimation of net infiltration from climatic data, by integrating a more realistic evapotranspiration algorithm that takes into

account the potential evapotranspiration rate (PET) and available soil water content in the soil reservoir S(t). The new value calculated during this step is referred to as “corrected evapotranspiration” (or CET). Net infiltration is equal to rainfall (P) minus corrected evapotranspiration (CET);

2. Module 2: Management of water transfer in the unsaturated zone, in order to calculate the net recharge into the drained water table, based on the conceptual reservoir approach. This module calculates net recharge as a function of the available soil water content in the soil reservoir S(t), relative to three distinct soil reservoir levels, namely minimum (S<sub>min</sub>), intermediate (S<sub>inter</sub>) and maximum (S<sub>max</sub>);
3. Module 3: Simulation of the SD discharge (Q) as a function of the mid-drain water table height above drain (H) by applying the SIDRA model (Lesaffre and Zimmer, 1988).



**Fig. 2.** Diagram presenting the three SIDRA-RU modules, with P: rainfall [LT<sup>-1</sup>], CET: corrected evapotranspiration [LT<sup>-1</sup>]; S(t): actual water level in the soil reservoir [L]; S<sub>min</sub>: minimum soil reservoir level (= 0 mm); S<sub>inter</sub>: Intermediate soil reservoir level [L]; S<sub>max</sub>: maximum soil reservoir level [L]; R(t): water table recharge [LT<sup>-1</sup>]; L: distance between the drain and mid-drain [L]; H: mid-drain water table height above drain [L]; and Q: drainage discharge per unit area [L<sup>3</sup>T<sup>-1</sup>L<sup>-2</sup>]. The dashed horizontal lines indicate the soil reservoir module levels.  $\alpha$ : partition coefficient representing the part of net infiltration which recharges the water table during the stage 2.

### 3.1. Calculation of the corrected evapotranspiration

To estimate net rainfall infiltration, this module calculates a more realistic evapotranspiration value, referred to here as corrected evapotranspiration (CET). This CET depends on the potential evapotranspiration (PET), the available soil water content in the soil profile and the type of vegetation (Hansen, 1984; Kristensen and Jensen, 1975). Depending on the type of vegetation, CET is transformed into the maximum evapotranspiration rate (MET) by means of the crop coefficient,  $\beta$ . When the soil water content lies in the range of the extractable soil water (ESW), the CET/PET ratio is equal to  $\beta$ . This value represents the share of the WHC that allows plants to extract water from the soil without either water constraints or growth limitations (Hansen, 1984; Jacquart and Choisnel, 1995). Soil WHC represents the amount of water held by soil against gravity force that can be extracted either by evaporation or by root plant (Bordoloi et al., 2019). Under France's agro-climatic conditions, ESW varies from 0.4 to 0.6 of WHC, as a function of root depth (Jacquart and Choisnel, 1995). In this study, ESW has been set equal to 0.6 of WHC. This value defines the lower limit of soil water content in the soil profile, at which CET equals the maximum evapotranspiration rate (MET). When the soil water content in the soil profile lies below ESW, less water is available for root extraction; Eq. 1 proposes an exponential decrease of CET with water level in the soil reservoir  $S(t)$ . To simplify the model parameterization and to take into account the non-uniformity of the soil water content in the soil profile, WHC has been approximated at the intermediate soil reservoir level  $S_{inter}$  of the conceptual soil reservoir model (Section 3.2 below). The module computes CET [L] as follows:

$$\begin{aligned} \text{Case1: If } (S(t) > 0.6 * S_{inter}) \quad & \text{CET} = \text{MET} = \beta * \text{PET} \\ \text{Case2: If } (S(t) < 0.6 * S_{inter}) \quad & \text{CET} = \beta * \text{PET} * \exp\left(-\frac{0.6 * S_{inter} - S(t)}{S(t)}\right) \\ \text{Case3: If } (S(t) < 0) \quad & \text{CET} = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

where  $S(t)$  [L] is the actual water level in the soil reservoir,  $\beta$  [-] is a correction coefficient that depends on the type of soil cover. In this study,  $\beta$  has been set equal to 1.

### 3.2. Management of water flow in the soil reservoir

It has been assumed herein that throughout the hydrological season, the soil water content only varies under the effects of rainfall, evapotranspiration and drainage discharge.

Modeling soil water movement in unsaturated zone to assess water table recharge should cover several complex processes (Milly, 1988; Nielsen et al., 1986; Šimůnek and Bradford, 2008; van Genuchten and Jury, 1987). In the literature, numerous models describing water flow in this zone are available and they use either physical-based or conceptual approach. In this study, we present a conceptual calculation of the water table recharge. Downward water movement through homogenous soil profile is governed mainly by both gravity and matric pressure gradients ( $\psi$ ) effects. When the soil is dry, the  $\psi$  gradients effect is dominating, and when the soil is very wet, gravity effect becomes dominant (Nimmo, 2005). Along the soil profile (extending from the soil surface to the impervious layer under the drains), the soil water content is not uniform and variable with respect to time (Zimmer and Lesaffre, 1989). Indeed, the soil profile can present at the same time dry condition near the soil surface and wet condition at the drain level. Thus, instead of considering this spatial variation, the soil reservoir model depicts the filling of the soil profile and calculates water table recharge as a function of three global thresholds (see Fig. 2), i.e.:

1) The minimum soil reservoir level ( $S_{min}$ ) represents the lower limit of the soil reservoir, below which no water moves in the soil under the

effects of either evaporation or root extraction, herein set equal to zero; this reflects the driest soil profile condition.

- 2) The maximum soil reservoir level ( $S_{max}$ ) represents the upper limit, at which the total net infiltration recharges the water table gravitationally. In this case, the soil water content lies close to the saturation condition throughout the soil profile. The SD network reaction to a rainfall event is rapid, mainly occurring during the high rainfall events that generate drainage discharge peaks. This subsurface drainage period is referred to as Intense Drainage Season (IDS).
- 3) Between  $S_{min}$  and  $S_{max}$ , the reservoir model includes an intermediate threshold ( $S_{inter}$ ). When the soil reservoir lies between  $S_{inter}$  and  $S_{max}$ , the soil water content can exhibit a saturation condition close to the drain, while remaining unsaturated at the upper part of the soil profile. In this case, one portion of the infiltrated water contributes to the water table recharge and flows toward drains. The other portion of the infiltrated water continues to fill the soil reservoir. The distribution of net infiltration between water table recharge and soil reservoir filling was conducted by means of partition coefficient  $\alpha$ . Thus, the  $S_{inter}$  defining the start of the drainage season is used as first soil reservoir parameter. The soil water level difference between  $S_{inter}$  and  $S_{max}$  is referred to as the intense drainage season reservoir level ( $S_{IDS}$ ). As  $S_{max}$  variations are dependent on that of  $S_{inter}$  ( $S_{max}$  must be greater than  $S_{inter}$ ),  $S_{IDS}$  is used as second soil reservoir parameter. The two parameters  $S_{inter}$  and  $S_{IDS}$  of the conceptual soil reservoir are difficult to estimate from a field measurement; they are mainly determined through model calibration.

The model responsible for managing the behavior of the unsaturated zone is referred to as the water holding capacity (WHC) concept, or RU (acronym for *réserve utile* in French). Consequently, the reservoir model will be referred to hereafter as the "RU" model. The conceptual reservoir ignores the deep infiltration flow, given that such contributions are often negligible during the winter period in hydromorphic soils, due to the presence of clayey layers underneath the drains, which in this study are assumed to be impervious.

In the RU module, water variations in the soil reservoir ( $\Delta S$ ) and water table recharge  $R(t)$  at time "t" both depend on the water level in the soil reservoir  $S(t)$  at time "t-1". The RU module considers the time variable  $S(t)$  and  $R(t)$  as uniform between the drain and mid-drain. The calculation algorithm can then be expressed as follows:

1. If  $S(t)$  lies between  $S_{min}$  and  $S_{inter}$ : net infiltration increases or decreases the water level in the soil reservoir, depending on its sign (negative or positive), hence:  $S(t) = S(t-1) + (P - \text{CET})$ . The minimum soil reservoir level cannot decrease below zero. During this stage, the water table recharge equals zero.
2. If  $S(t)$  lies between  $S_{inter}$  and  $S_{max}$ : when net infiltration is positive, the RU module splits this infiltration into two components via partition parameter  $\alpha$ , with the first part ( $\alpha$ ) recharging the water table and the second part  $(1-\alpha)$  continuing to fill the soil reservoir:

$$\begin{aligned} S(t) &= S(t-1) + (1-\alpha) * (P - \text{CET}) \\ R(t) &= \alpha * (P - \text{CET}) \end{aligned} \quad (2)$$

1. If  $S(t)$  is equal to  $S_{max}$ : when net infiltration is positive, the entire excess infiltration will recharge the water table. Otherwise, when net infiltration is negative, the net infiltration rate will be extracted from the soil reservoir.

### 3.3. Management of water table flow

In this study, the original SIDRA model is used to simulate water table flow toward drain. The specificity of SD in France is that the drains overlay a clayey layer, assumed herein as impervious. SD flow only occurs when the perched water table rises above the drain, as identified during the intense drainage season. The SIDRA model is only able to

simulate drainage discharge during this season. The model does not consider unsaturated flow, by assuming that the net infiltration, calculated as rainfall minus evapotranspiration rate, instantly reaches the water table (Bouarfa and Zimmer, 2000; Lesaffre and Zimmer, 1988; Zimmer et al., 1995).

Water flow toward the drain is influenced by several parameters related to both the SD network geometry (i.e. drain depth and drain spacing) and soil hydrodynamic characteristics. The SIDRA model semi-analytically solves the Boussinesq equation according to the following basic assumptions (Bouarfa and Zimmer, 2000; Lesaffre and Zimmer, 1988):

1. The perched water table is a free (unconfined) surface that overlays the impervious horizontal clayey layer. Within the saturated zone, the subsurface flow is assumed to be horizontal, in accordance with Dupuit-Forchheimer (Guyon, 1963; Van Schilfgaarde, 1963);
2. The Boussinesq equation is based on the concept of drainable porosity (De Marsily, 1986; Zhang and Zhang, 1986), which serves to relate water table fluctuations to water table recharge. This parameter is also approximated with a “specific yield” or “specific storage” value (Anderson and Woessner, 1992; Rupp and Selker, 2005).

In homogeneous soils, based on these assumptions, a combination of the continuity equation and Darcy’s Law leads to the classical 1D nonlinear Boussinesq equation (1904):

$$\mu \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_{\text{sat}} h \frac{\partial h}{\partial x} \right) + R(t) \quad (3)$$

where  $K_{\text{sat}}$  [ $\text{LT}^{-1}$ ] is the saturated hydraulic conductivity in the horizontal direction,  $h$  [L] the water table height above the drain,  $\mu$  [-] the drainable porosity,  $R(t)$  [ $\text{LT}^{-1}$ ] the time-dependent water table recharge,  $t$  [T] the time, and  $x$  [L] the horizontal position coordinate.

The Boussinesq equation simulates drainage discharge and water table variations assuming that the water table shape remains constant or slightly variable during the steady state or tail recession stages (Guyon, 1963; Van Schilfgaarde, 1963). Modeling of the transient state of a water table depends on the time step adopted (from hourly to daily). For a daily time step, the Boussinesq assumption of a constant water table shape is acceptable, as demonstrated by Tournabize et al. (2004). This assumption allows for a pseudo-separation of variables in both time and space. The spatial integration of the water table shape between drain and mid-drain, using the factor concepts developed by Guyon (1963) and Youngs (1966), results in the following equation solely dependent on the time variable:

$$\mu C \frac{dH(t)}{dt} = -K_{\text{sat}} \frac{H^2}{L^2} + R(t) \quad (4)$$

where  $C$  [-] is defined as the “second water table shape factor”,  $L$  [L] the half-drain spacing, and  $H$  [L] the water table elevation above the drain at mid-drain. The term  $J(H) = K_{\text{sat}} \frac{H^2}{L^2}$  [ $\text{LT}^{-1}$ ] represents an equivalent Hooghoudt equation (Hooghoudt, 1940; Van Der Ploeg et al., 1999) describing the steady-state drainage discharge, in assuming that the drain lies on the impervious horizontal layer. Further details of different steps establishing the model equations can be found in the publication by Bouarfa and Zimmer (2000).

From Darcy’s Law, let’s now add the influence of recharge, as established by Lesaffre and Zimmer (1987), which yields the following equation to calculate drainage discharge:

$$Q(t) = AJ(H) + (1 - A)R(t) \quad (5)$$

where  $A$  [-] is called the “third water table shape factor”.

The water table shape factors  $C$  and  $A$  are equal to 0.904 and 0.896, respectively, as calculated by integrating  $\frac{1}{4}$  of the ellipse curve, corresponding to the water table shape between drain and mid-drain (Bouarfa

and Zimmer, 2000). Eq. 5 reveals that during the recharge stage, drainage discharge  $Q(t)$  is generated by: (i) the water table recession based on the Hooghoudt equation (the  $AJ(H)$  term), and (ii) the direct contribution of net recharge (the  $(1-A)R(t)$  term). In Eq. 5, the water table shape factor  $A$  enables the water table recession to contribute to drainage discharge by a factor of 86.9%, to be subsequently completed with the direct recharge at 13.1%  $(1-A)$  of  $R(t)$ .

In this study, surface runoff is calculated using a simplified approach. Several empirical models are available to calculate surface runoff, such as the model by Horton, and Green and-Ampt (Musy and Higy, 2004). However, most of these models are based on parameters that lack physical meaning and can only be defined by model calibration. The simplest empirical approach consists of assuming that surface runoff occurs when the soil reservoir reaches its maximum storage capacity (Dooge, 1959), i.e. when the soil profile is totally saturated and the water table lies near the soil surface. We thus assume that the generation of surface runoff is independent of the soil infiltration capacity in drained soils. Observations in drained fields do indeed show that the surface runoff rate is reduced, compared to an undrained field, and moreover account for roughly 10% of total outflow, thus confirming the high infiltration capacity of drained soils (Augeard et al., 2005; Kao et al., 1998; Trajanov et al., 2018). In the SIDRA-RU model, when the water table elevation ( $H$ ) equals drain depth ( $d$ ), the excess rainfall is converted into surface runoff.

#### 4. Model evaluation

The aim of this study is to validate the ability new SIDRA-RU model to address the tasks of drainage discharge and drain flow start at the field scale based on the existing experimental observations. We begin by assessing the model performance in order to simulate drainage discharge using the classical calibration and validation criterion KGE (Gupta et al., 2009). Next, we evaluate the model by predicting the drain flow start. A criterion determining the drain flow start dates from both observed and simulated drainage discharge is presented. We finish by conducting an analysis to assess the sensitivity of model parameters with respect to KGE and the drain flow start criteria.

##### 4.1. Model calibration and validation

Running SIDRA-RU requires introducing input data (rainfall and evapotranspiration) as well as field characteristics. The SD geometry data consist of the 0.8-m drain depth ( $d$ ) and the 5-m half-drain spacing ( $L$ ). The correction coefficient for the CET calculation, which depends on the type of soil cover ( $\beta$ ), equals 1.

The water partition parameter ( $\alpha$ ) is not considered for model calibration, because its influence on model calibration using observed drainage discharge is negligible (See sensitivity analysis results, Section 5.1). During the period when drainage season starts (delimited by  $S_{\text{inter}}$  and  $S_{\text{max}}$ ), the ratio of drainage discharge to rainfall is typically low. Field observations have indeed shown that during this period, the ratio equals approximately 1/3 (Favrot and Lesaffre, 1984; Lesaffre, 1988; Lesaffre and Morel, 1986). The partition coefficient  $\alpha$  is thus set theoretically at 1/3.

The calibration model parameters are: the two soil reservoir parameters ( $S_{\text{inter}}$  and  $S_{\text{DS}}$ ), and the two soil hydrodynamic parameters ( $K_{\text{sat}}$  and  $\mu$ ). This modeling approach assumes uniform hydraulic properties within the soil profile, thus leading to calibrate an average value of the parameters set for each plot.

A performance assessment of the model must acknowledge the fact that drainage discharge is highly variable during the drainage season. To account for this seasonal variability, the Kling-Gupta efficiency (KGE, Gupta et al., 2009) criterion (Eq. 6) is used for model calibration and validation. This KGE criterion has the advantage of incorporating drainage discharge variability throughout the simulation period by combining the correlation, bias and variability between simulated and

observed drainage discharges:

$$KGE = 1 - \sqrt{(r - 1)^2 + (\varepsilon - 1)^2 + (\Delta - 1)^2} \quad (6)$$

where  $\Delta$  denotes the ratio between the mean simulated and mean observed drainage discharges (i.e. the bias),  $r$  the linear correlation between observations and simulations, and  $\varepsilon$  the measure of relative variability. KGE values range from  $-\infty$  to 1. The model performance is improved when the value of KGE lies close 1 (Gupta et al., 2009).

The limited number of calibration parameters in SIDRA-RU serves to limit the equifinality problem and the possibility of obtaining secondary optima (Coron et al., 2017). The optimization algorithm is based on the drainage discharge results, using the KGE criterion as Objective Function (OF) combined with “airGR” R package (Coron et al., 2017, 2021). First, a grid-screening algorithm explores the parameters space by systematic examination and extracts the most likely convergence zone. Second, a steepest - descent local search procedure seeks to improve the OF by refining the previously obtained parameter set. Note that each parameter is independently calibrated without considering their possible correlations. The sampling procedure is based on the probability distribution function (pdf) and the limits of the four calibration parameters (Table 3):

1.  $K_{sat}$  and  $\mu$  follow a log-normal distribution (Kosugi, 1999; Ren and Santamarina, 2018; Rouseva et al., 2017; Schaap and van Genuchten, 2006; Suleiman and T. Ritchie, 2001). The pdf and the limits of hydraulic conductivity  $K_{sat}$  and drainable porosity  $\mu$  values in Table 3 were established from 35 hydrodynamic measurements in different drained hydromorphic soils by means of Guyon’s pumping test (Lesaffre, 1990). These experiments were carried out in the 1980’s as part of the measurement campaign initiated by the French Ministry of Agriculture that allowed establishing 70 referenced soil areas (Lagacherie, 1987);
2. The soil reservoir parameters ( $S_{inter}$  and  $S_{IDS}$ ) follow a normal distribution similar to that used for maximum soil water content (Biswas, 2019; Brocca et al., 2007);

The model evaluation is performed using the split-sample test (Klemeš, 1986), by dividing the 16 seasons (Table 2) of daily drainage discharge measurements into two equivalent periods: Period P1, from 1994 to 2002, and Period P2, from 2002 to 2010. For each period, the model was run in turn for both calibration and validation of drainage discharge. Fig. 3 shows the mean variations in yearly cumulative rainfall and drainage during these two periods on plots T03 and T04. Note that Period P1 is wetter than P2, with a higher variation in the yearly cumulative rainfall and drainage discharge (Fig. 3 displays the various box widths). It then becomes interesting to test the behavior of model calibration and validation during these two defined periods.

#### 4.2. Assessment of drain flow start dates

To assess model accuracy in predicting the drain flow start, a criterion has been established in this study, based on the mean of the absolute difference between observed and simulated drain flow start dates ( $X_{diff}$ ).

**Table 3**  
Characteristics of the pdf representing the variations in SIDRA-RU parameters.

SIDRA-RU parameters	Pdf type	Limit interval		Mean	Standard deviation
		Min	Max		
$S_{IDS}$ (mm)	Normal	10	55	33.3	17
$S_{inter}$ (mm)	Normal	55	225	138.4	53.3
$K$ (m/day)	Log-normal	0.03	4.63	0.9	3.17
$\mu$ (-)	Log-normal	0.015	0.13	0.031	1.926

This criterion is calculated as follows:

$$X_{diff} = \text{mean}[\text{abs}(\text{Date}_{obs} - \text{Date}_{sim})] \quad (7)$$

where  $\text{Date}_{sim}$  and  $\text{Date}_{obs}$  (in Julian days) are the determined dates of drain flow start from the observed and simulated drainage discharge, respectively, using this dynamic threshold; “abs” represent the absolute value.

The best date prediction occurs when  $X_{diff}$  lies near zero. This criterion, in calculating a mean value for the 8 drainage seasons for each period, is sufficient to evaluate model performance in predicting the drain flow start. It is not used however for model calibration.

#### 4.3. Sensitivity analysis of the performance criteria

The objective of the sensitivity analysis is to identify the model input parameters exerting the greatest influence on two performance criteria, namely drainage discharge (using KGE criterion) and the drain flow start criterion ( $X_{diff}$ ).

Several sensitivity analysis methods are available to analyze model effectiveness (Iooss and Lemaître, 2015; Saltelli, 2008). In light of the low number of input parameters, it is possible to perform a global sensitivity analysis (GSA) of SIDRA-RU using the Sobol method (Sobol, 1993), based on the variance decomposition principle. The purpose of this method is to allocate a fraction of the total variance in the evaluation criterion to each model parameter. The main advantage of this method is its strong performance with nonlinearities that can be often problematic in hydrological modeling (e.g Gatel et al., 2019; Muñoz-Carpena et al., 2007). When considering a model with several parameters, the Sobol method allows quantifying their impact on the model response as well as their interactions regarding the evaluation criterion (Pianosi et al., 2016; Saltelli et al., 2000).

The total variance of the model output, in this case the quality criteria of drainage discharge and  $X_{diff}$ , is allocated to each parameter using two sensitivity indices: the first-order sensitivity index (Si), and the total sensitivity index (TSi). The Si index represents the direct impact of each parameter taken alone on total variability, while TSi is defined as the sum of the impact of each parameter taken alone and in interaction with others on total variability. Several methods exist to define the Si and TSi index values, and no single one prevails over the others. Consequently, it is recommended to use several methods to compute the sensitivity indices in order to assess the robustness of GSA. In this study, we tested three variance estimators from (i) Saltelli (2002), named Saltelli2002, (ii) Jansen (1999), named Jansen, and (iii) Martinez (2011), named Martinez. Si has been computed based on the same estimators as TSi, plus the Roalhs estimator (Tissot and Prieur, 2015), named ROALHS.

The SIDRA-RU sensitivity analysis is focused on the following parameters: soil hydraulic conductivity ( $K_{sat}$ ), drainable porosity ( $\mu$ ), intermediate reservoir level ( $S_{inter}$ ), the intense drainage season reservoir level ( $S_{IDS}$ ), and partition coefficient  $\alpha$ . The Sobol sampling procedure is based on the probability distribution function (pdf) and the limits defined for all calibration parameters presented in Table 3 and the partition coefficient  $\alpha$ , which follows a uniform distribution and ranging from 0 to 1.

In practice, input parameter was sampled in its respective pdf, as defined in Table 3. The sampling size was  $n = 1000$ , and the total number of simulations for  $N_p = 5$  parameters was thus:  $N_{tot} = (N_p + 2) * n = (5 + 2) * 1000 = 7000$ . Bootstrap methods were then implemented to evaluate the uncertainty associated with each estimator, considering the 95% confidence interval, and 100 bootstrap replicates.

## 5. Results

This section reports the results obtained by the SIDRA-RU model in terms of optimal criterion performance. The first subsection will discuss the sensitivity analysis results of the five model parameters ( $K_{sat}$ ,  $\mu$ ,  $S_{inter}$ ,

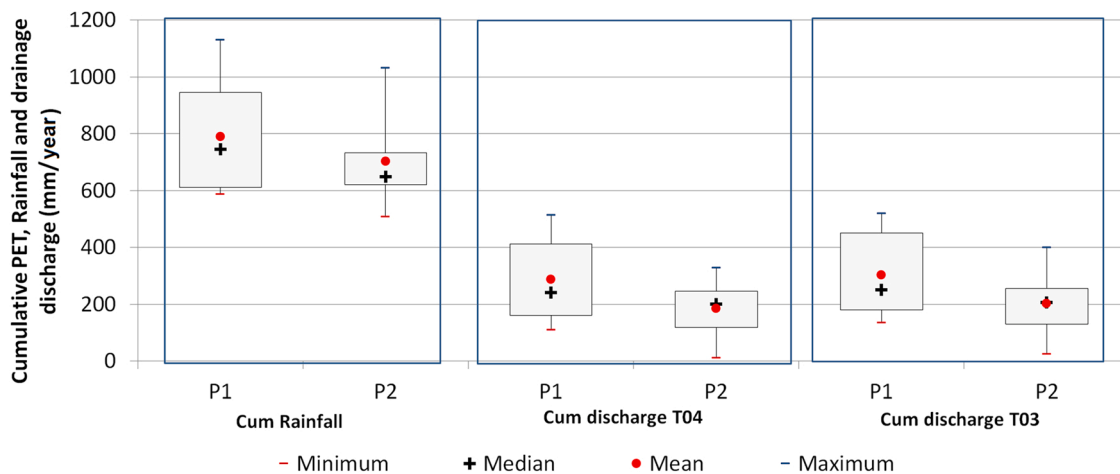


Fig. 3. Comparison between periods P1 and P2 - the mean variations in yearly cumulative rainfall and drainage discharge data on plots T03 and T04. The boxes are delimited by the 25% and 75% quartiles.

$S_{IDS}$  and  $\alpha$ ) with respect to the drainage discharge (by mean of KGE criterion) and  $X_{diff}$  criteria. The second subsection will provide the results obtained for the calibration and validation of four model parameters ( $K_{sat}$ ,  $\mu$ ,  $S_{inter}$  and  $S_{IDS}$ ) using the daily drainage discharge in the KGE criterion, and analyze the results obtained for yearly cumulative of drainage discharge and surface runoff. Next, the reliability of the model in predicting the drain flow start will be assessed using the  $X_{diff}$  criterion. The assumption of approximating the soil WHC by  $S_{inter}$  (Section 3.1) will be assessed by comparing the  $S_{inter}$  values and the measured WHC for both plots T03 and T04 (Table 1).

5.1. Sensitivity analysis

Drainage discharge simulation T04\_P1 (Table 4, Section 5.2) has been used as a reference for the sensitivity analysis of the five SIDRA-RU model input parameters ( $K_{sat}$ ,  $\mu$ ,  $\alpha$ ,  $S_{inter}$ ,  $S_{IDS}$ ). This analysis generated 20 first-order indices (Si) and 15 total-order indices (TSi) per criterion (using drainage discharge and  $X_{diff}$ ). Fig. 4 shows that the various methods used, all present a similar hierarchy of input effects on each criterion, with small deviations, thereby confirming the reliability of the sensitivity analysis conducted. As regards the drainage discharge, hydraulic conductivity ( $K_{sat}$ ) is the parameter featuring the highest Si index (from 0.4 to 0.6); it explains nearly half of the total model variance with respect to this criterion. Drainable porosity  $\mu$  reflects values of the Si index around 0.2. The TSi index exhibits an identical trend; its values for  $K_{sat}$  are close to 0.8 and for  $\mu$  close to 0.5. The last three parameters ( $\alpha$ ,  $S_{inter}$ ,  $S_{IDS}$ ) all display values for both the Si and TSi indices of close to zero and have negligible influence on drainage discharge. Saltili2002 (Saltelli, 2002) and Martinez (Martinez, 2011) estimators show a greater difference between Si and TSi for  $K_{sat}$  and  $\mu$ , hence highlighting strong interactions between them. In contrast, the TSi for  $\alpha$ ,  $S_{inter}$  and  $S_{IDS}$  parameters lie close to zero, thus indicating that taken alone or interacting with others, these parameters exert no influence on drainage discharge. In considering the very limited effect of parameters  $\alpha$ ,  $S_{inter}$  and  $S_{IDS}$ , it can be concluded that the interactions are essentially

occurring between  $K_{sat}$  and  $\mu$ , thus demonstrating that these two parameters are the only ones sensitive to the drainage discharge.

As regards the  $X_{diff}$  criterion,  $S_{inter}$  is the parameter with the highest Si and TSi indices, with values close to 0.8 for both, hence the importance of this parameter in the model defining drain flow start. The TSi and SI index values for  $S_{IDS}$  are nearly zero, thus demonstrating that the  $X_{diff}$  criterion is insensitive to this parameter taken alone or in interaction with the other model parameters. Parameter  $\alpha$ , reflecting values of Si index around 0.1 and TSi index around 0.18, has little impact on the model performance regarding the drains flow start. The hydrodynamic soil parameters  $K_{sat}$  and  $\mu$  exert no influence on the  $X_{diff}$  criterion.

5.2. Model performance assessment

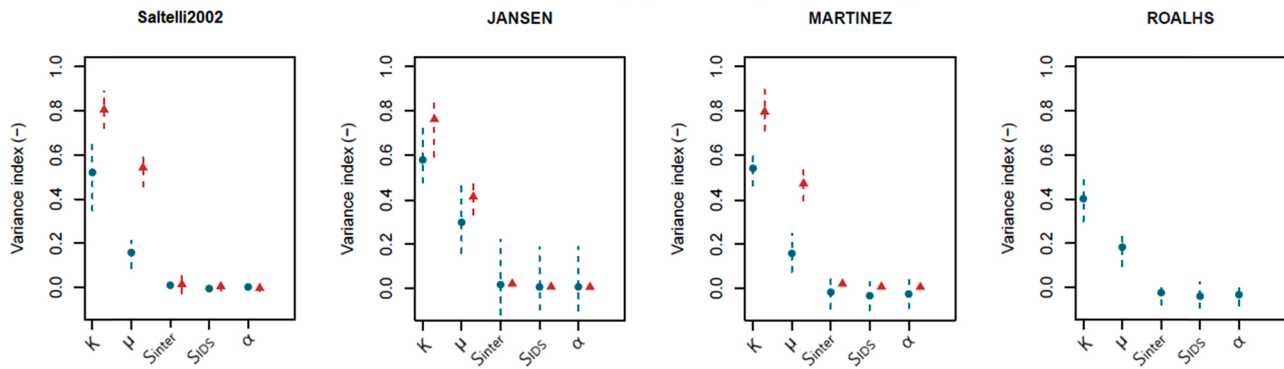
The split-sample test yields calibration and validation results in two parameter sets for each plot (Table 4). Simulations using either period P1 or P2 for calibration are followed by the suffix P1 or P2, for plots T03 and T04, respectively. The KGE values obtained exceed 0.81 for calibration and 0.75 for validation, thus indicating that model calibration can be considered good enough for hydrological modeling (Knoben et al., 2019). However, the calibrated parameters differ slightly depending on the selected calibration period. This variability is mainly influenced by the hydrological variability of period P1, as compared with P2 (Fig. 3). For the various calibration tests, the resulting values of drainable porosity  $\mu$  are identical, while those of hydraulic conductivity  $K_{sat}$  range from 0.54 to 0.73 m/day. This difference is more pronounced for the soil reservoir parameters. Note that the calibrated  $S_{inter}$  values overestimate the measured WHC, calculated as water held by the soil between the drain and the soil surface (see Table 1). As the WHC has been approximated by  $S_{inter}$  (see Section 3.1), this result reveals that part of the soil below the drains can contribute to water storage before the start of the drain flow.

The graphical comparison between the measured and simulated drainage discharges of plot T04, using calibration period P1 (simulation T04\_P1), is illustrated in Fig. 5. The results obtained from plot T03 show

Table 4  
Split-sample test results of model performance based on drainage discharge data from plots T03 and T04.

Simulation	Calibration period P1 (1994–2002)		Validation period P2 (2002–2010)		Calibrated parameters			
	KGE		KGE	$x_{diff}$ (days)	$K_{sat}$ (m/d)	$\mu$ (-)	$S_{inter}$ (mm)	$S_{max}$ (mm)
T03_P1	0.846		0.751	5.5	0.73	0.05	105.5	110.6
T04_P1	0.818		0.82	8.0	0.71	0.05	119.3	127.1
	Calibration period P2 (2002–2010)		Validation period P1 (1994–2002)		Calibrated parameters			
T03_P2	0.839		0.78	7.5	0.54	0.05	102.4	130.7
T04_P2	0.871		0.785	6.0	0.73	0.05	140.0	152.9

(a) Drainage discharge



(b)  $X_{diff}$

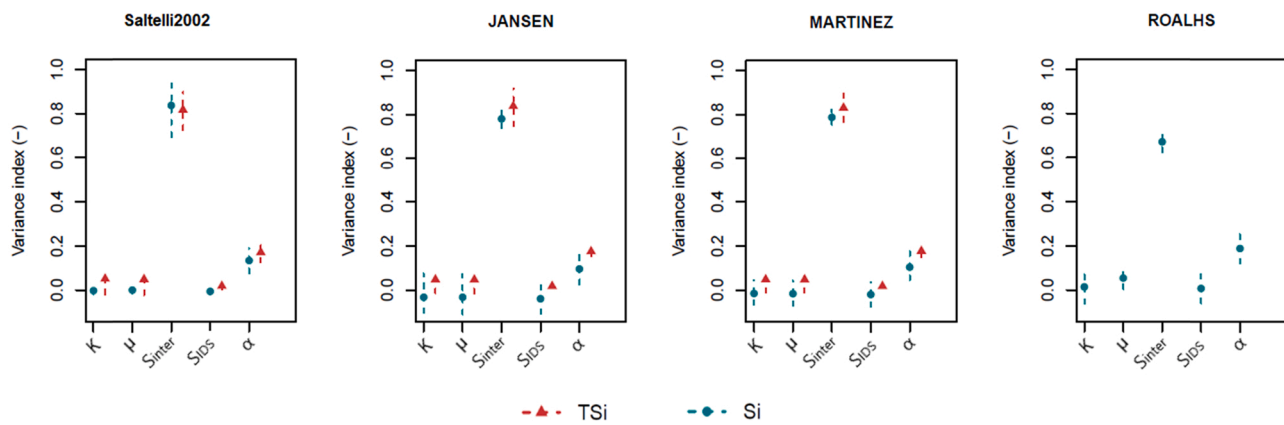


Fig. 4. Sensitivity analysis of the five SIDRA-RU model input parameters with respect to both drainage discharge and  $X_{diff}$  criteria using the Sobol method with four variance estimators (Saltelli2002 (Saltelli, 2002), Martinez (Martinez, 2011), Jansen (Jansen, 1999) and Roalhs (Tissot and Prieur, 2015)). The blue points represent the first-order Sobol (Si) indices and red points the Total-order Sobol (TSi) indices; dashed lines indicate the uncertainty of each index, considering the 95% confidence interval.

the same variations as from plot T04, discussed herein. The two graphs, for the calibration and validation steps, indicate that the simulated daily drainage discharge is in good agreement with observed values, during both high and low drainage seasons (Fig. 5). This simulation slightly underestimates the observed peak discharge and slightly overestimates the low and medium discharge values. The model does not capture some of the observed peak flows, such as those in July 2001, August 2003 and July 2009, and does not correctly simulate the drain flow start of some drainage seasons, e.g. December 2001. These inaccuracies might be explained by the use of SAFRAN rainfall, defined on an 8 km × 8 km grid instead of that measured in the field as input data, or else by drainage discharge measurement errors, which are difficult to verify. Aside from these few simulation shortcomings, the model faithfully reproduces the drainage discharge observations.

For simulation T04\_P1, Fig. 6 shows the variations in yearly cumulative rainfall, the measured and simulated drainage discharge and surface runoff (mm/season), and the drainage flow start time differential (days). At the scale of a hydrological season, except for a few wet years, the simulated cumulative drainage discharge lies close to the observed values (to within 10%). The mean simulated drainage discharge of 250 mm/season is in good agreement with the observed volume of 236 mm/season (Table 2). The yearly simulation of surface runoff (calculated by the model as excess rainfall) is of the same order of magnitude as the available data observations (from 1995 to 2004).

The reliability of the SIDRA-RU model in predicting drain flow start was also assessed using the  $X_{diff}$  criterion (Eq. 7). The median values of  $X_{diff}$  are less than 8 days for both plots (Table 4). For simulation T04\_P1,

Fig. 6 shows that the model accurately simulates the drain flow start, except for seasons 1994–95 and 1998–99, when the difference in simulated and observed drain flow start times was equal to 34 and –32 days, respectively. For the entire simulation period, the model output a median  $X_{diff}$  value of 5 days with a standard deviation of 10 days. These results demonstrate that model calibration based on the drainage discharge observation does not reduce the large discrepancies between drain flow start observation and simulation.

6. Discussion

The main objective of integrating a soil reservoir module (RU) into the SIDRA model consists of simulating a continuous drainage discharge over several hydrological years, as opposed to the original SIDRA model, which is only applied during the intense drainage season and a priori qualified by users. The SIDRA-RU performance analysis has been based on optimizing the four model parameters ( $K_{sat}$ ,  $\mu$ ,  $S_{inter}$ ,  $S_{IDS}$ ) to maximize calibration criterion KGE, based on drainage discharge. The comparison between daily observation and simulation of drainage discharge proves to be satisfactory in most seasons examined. Simulations reveal good flow dynamics, with KGE values greater than 0.75, which are efficient in hydrological modeling (Knoben et al., 2019). The peak flows have been correctly simulated, yet some events have been slightly under- or overestimated. These small deviations might be related to the input data or the model’s simplifying hypothesis, e.g. neglecting deep infiltration and preferential flow (Pleur et al., 2020). In terms of yearly cumulative drainage discharge and surface runoff, these results show



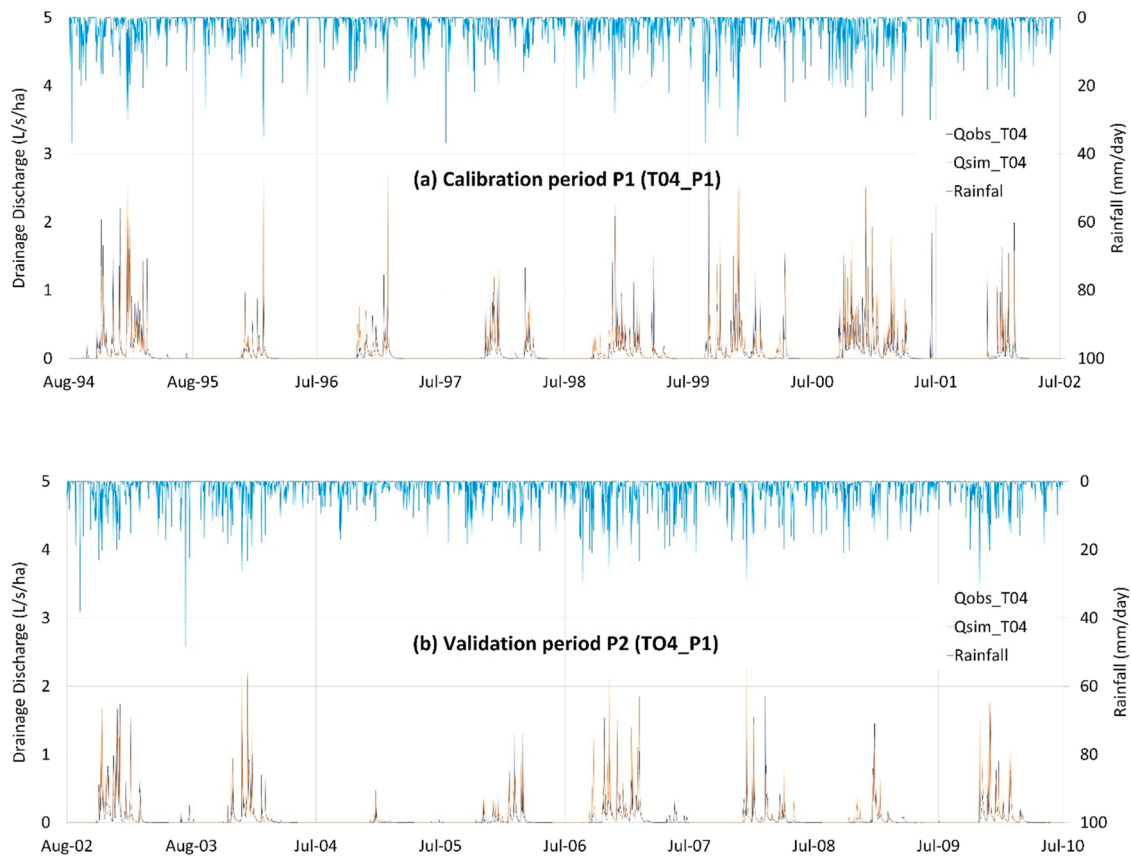


Fig. 5. Calibration (period P1) and validation (period P2) of the SIDRA-RU model using observation data from plot T04.

that the simulations lie very close to the observations. As for the observations themselves (Table 2), the simulated surface runoff is less than 12% of total outflow.

The model evaluation demonstrates that for most drainage seasons, the observed drain flow start times are predicted with good accuracy. However, large gaps can be noticed when predicting the drain flow start times for certain seasons; the main cause may be related to the rainfall regime. Indeed, continuous rainfall does in fact cause a progressive rewetting of the soil profile until formation of the perched water table. Any heavy rainfall on dry soil can generate preferential flow toward the drains before total saturation of the soil profile (Zimmer, 1992). Since this process is neglected in SIDRA-RU, the prediction of drain flow start time gets delayed. Despite such simulation differences, the model is still capable of predicting drain flow start with a relatively acceptable standard deviation of 10 days. Thus, the model can offer farmers and agricultural operators accurate critical period to avoid the application of pesticides and fertilizers, other than changing or limiting their application to the autumn or winter period (Brown and van Beinum, 2009; Lewan et al., 2009).

The sensitivity analysis of SIDRA-RU parameters, according to the Sobol method, indicates that model performance with respect to the drainage discharge (using KGE Criterion) solely depends on hydrodynamic parameters  $K_{sat}$  and  $\mu$ . The soil reservoir parameter  $S_{inter}$ , which describes the threshold when the soil reservoir is capable of recharging the drained water table, has negligible impact on model sensitivity, as regards drainage discharge. Meanwhile, model performance relative to the drain flow start (as described by the  $X_{diff}$  criterion) mainly depends on the parameter  $S_{inter}$ .

In our modeling approach, the soil hydrodynamic parameters  $K_{sat}$  and  $\mu$ , governing the water table flow, have zero impact on the determination of the drain flow start dates. Indeed, the water table only starts to form when water storage in the soil reservoir lies above the  $S_{inter}$

threshold in the RU module (Section 3.2). This module considers the unsaturated zone as a single reservoir system defined by its storage level parameters ( $S_{inter}$  and  $S_{IDS}$ ), with instantaneous input (net infiltration) and output (water table recharge). Thus, the RU module does not take into account dynamic flow in the unsaturated zone (e.g. (Niswonger et al., 2006)) nor any influence of the soil hydrodynamic parameters.

The sensitivity analysis has also shown that model parameter  $\alpha$  has a negligible impact on the model performance regarding the drainage discharge, thus confirming the assumption to set this parameter to 1/3, within the limit of the SIDRA-RU model proposed in this study (Section 3.2). However, this parameter has a little influence when defining the drain flow start.

*In situ*, the soil hydrodynamic parameters ( $K_{sat}$ ,  $\mu$ ) can be estimated using Guyon's pumping test (Chossat, 1995; Guyon and Lesaffre, 1986; Lesaffre, 1990). However, the field estimation of the soil reservoir parameters ( $S_{inter}$  and  $S_{IDS}$ ) is difficult. Theoretically, their values lie close to the measured WHC of the soil profile, which is available from farming professionals. We would suggest determining these values by means of model calibration based on the drain discharge observations.

## 7. Conclusion

This study has presented a modeling strategy based on the integration of a new module (RU) in order to manage the behavior of the SIDRA model's soil reservoir. This novel concept allows calculating the recharge of the perched water table. Integration of the RU module makes it possible to simulate the flow of soil water through the drainage system. This model is run with four parameters, serving to control the behavior of both soil water storage and hydrodynamic flow of the perched water table, both of which are determined by means of model calibration.

Application of SIDRA-RU at the "La Jaillière" experimental site has

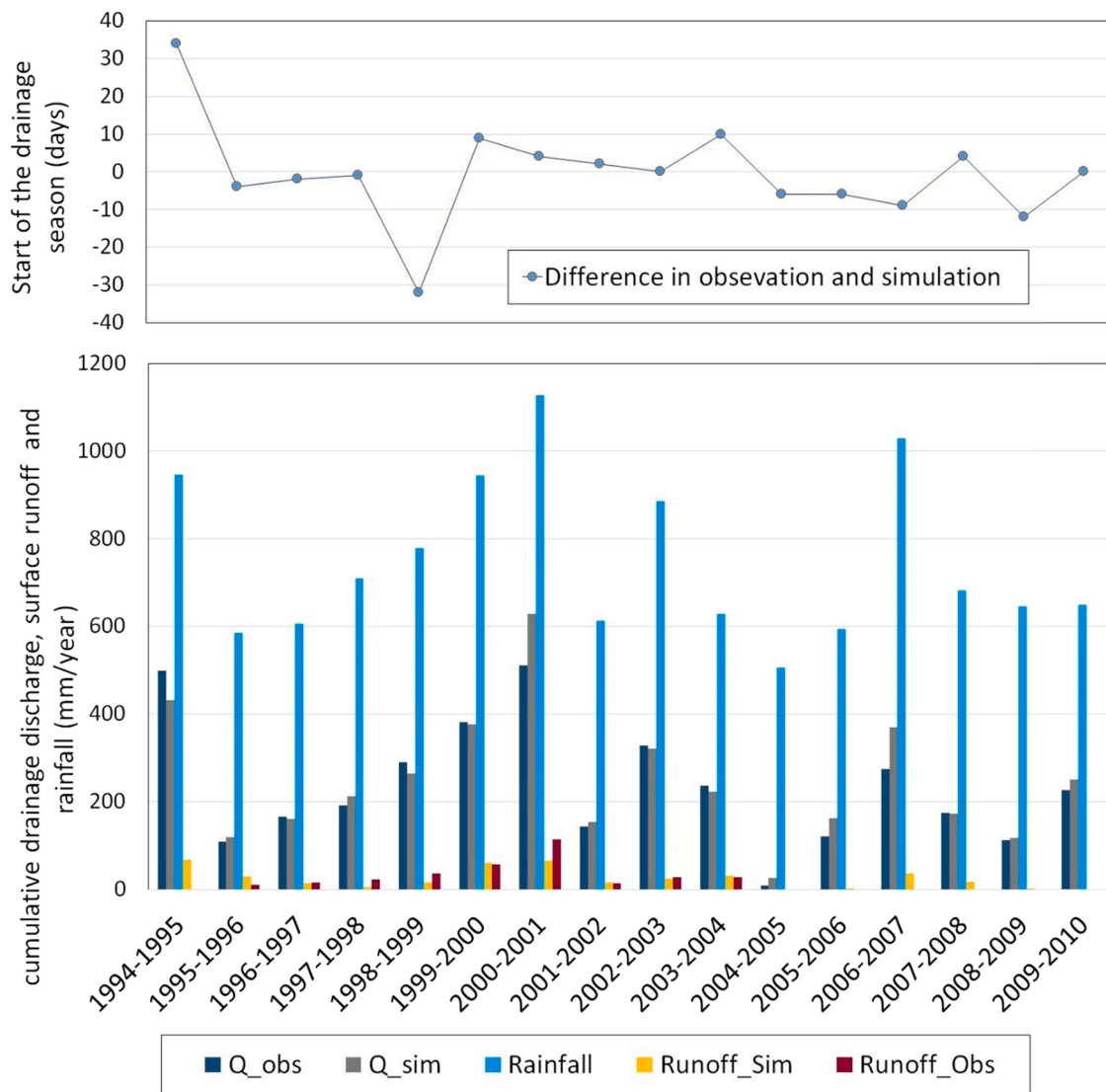


Fig. 6. Comparison between yearly cumulative observation and simulation results for plot T04, using the parameter set of calibration period P1 (T04\_P1): rainfall, simulated and observed drainage discharge and surface runoff [mm/year], and the difference in simulated and observed drainage flow start times [days].

revealed its efficiency in simulating drainage discharge during both wet and dry seasons. Simulation output is in good agreement with the observed daily drainage discharge and yearly cumulative volume in most of the seasons studied; in addition, the model correctly identifies the drain flow start, i.e. accurate to within a median value of 5 days and a standard deviation of 10 days.

The sensitivity analysis conducted for five model parameters ( $K_{sat}$ ,  $\mu$ ,  $\alpha$ ,  $S_{inter}$ ,  $S_{IDS}$ ) indicates various dependencies on the performance criteria tested. The calibration of drainage discharge is mainly sensitive to hydraulic conductivity and drainable porosity, whereas the determination of drain flow start time is sensitive to the soil reservoir parameter  $S_{inter}$ . To reduce simulation uncertainties, it is recommended to calibrate  $S_{inter}$  and  $S_{IDS}$  independently of the  $K_{sat}$ ,  $\mu$  calibration using the observed drainage discharges.

The model's ability to predict drain flow start times with good accuracy allows preventing the transfer of agricultural pollutants into the water surface. Predicting the first drainage flows, using 6-days weather forecasts, allows farmers and agricultural operators to plan for the critical application timing and, hence, reduce the level of pesticide transfer. Moreover, this new model simulates the drained yearly volume with a good level of approximation, thus offering the potential for realistic estimations of the annual transfer of various pollutants of

agricultural origin by means of SD systems.

**Declaration of Competing Interest**

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

**Acknowledgments**

The authors would like to thank ARVALIS Agricultural Institute (formerly ITCF) for its support in providing the data acquired by the institute from its experimental site at La Jaillière.

**References**

AGRESTE, 2010. Agricultural Census. Ministry of Agriculture, Food and Forestry,, France.  
 Al Jabri, S.A., Youngs, E.G., 2015. Steady-state water tables in drained lands modeled using the HYDRUS package and compared with theoretical analyses. *J. Irrig. Drain. Eng.* 141 (9), 04015010 [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)IR.1943-4774.0000881](https://doi.org/10.1061/(ASCE)IR.1943-4774.0000881).  
 Anderson, M.P., Woessner, W.W., 1992. Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport.

- Augeard, B., Kao, C., Chaumont, C., Vauclin, M., 2005. Mechanisms of surface runoff genesis on a subsurface drained soil affected by surface crusting: a field investigation. *Phys. Chem. Earth* 30 (8–10), 598–610.
- Biswas, A., 2019. Joint multifractal analysis for three variables: characterizing the effect of topography and soil texture on soil water storage. *Geoderma* 334, 15–23. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2018.07.035>.
- Blann, K.L., Anderson, J.L., Sands, G.R., Vondracek, B., 2009. Effects of agricultural drainage on aquatic ecosystems: a review. *Crit. Rev. Environ. Sci. Technol.* 39 (11), 909–1001. <https://doi.org/10.1080/10643380801977966>.
- Boithias, L., Sauvage, S., Srinivasan, R., Leccia, O., Sánchez-Pérez, J.-M., 2014. Application date as a controlling factor of pesticide transfers to surface water during runoff events. *CATENA* 119, 97–103. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2014.03.013>.
- Boivin, A., Šimůnek, J., Schiavon, M., van Genuchten, M.T., 2006. Comparison of pesticide transport processes in three tile-drained field soils using HYDRUS-2D. *Vadose Zone J.* 5 (3), 838–849. <https://doi.org/10.2136/vzj2005.0089>.
- Bordoloi, R., Das, B., Yam, G., Pandey, P.K., Tripathi, O.P., 2019. Modeling of water holding capacity using readily available soil characteristics. *Agric. Res.* 8, 347–355.
- Bouarfafa, S., Zimmer, D., 2000. Water-table shapes and drain flow rates in shallow drainage systems. *J. Hydrol.* 235 (3–4), 264–275.
- Boussinesq, J., 1904. Recherches théoriques sur l'écoulement des nappes d'eau infiltrées dans le sol et sur le débit des sources. *J. De. Mathématiques Pures Et. Appliquées* 10, 5–78.
- Brocca, L., Morbidelli, R., Melone, F., Moramarco, T., 2007. Soil moisture spatial variability in experimental areas of central Italy. *J. Hydrol.* 333 (2), 356–373. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2006.09.004>.
- Brown, C.D., van Beinum, W., 2009. Pesticide transport via sub-surface drains in Europe. *Environ. Pollut.* 157 (12), 3314–3324. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2009.06.029>.
- Chossat, J.C., 1995. Qualité des sols: méthode de mesure de la conductivité hydraulique horizontale équivalente et de la porosité de drainage in situ. *Méthode De. Guyon. Norme NF X 31–504*.
- Coron, L., Delaigue, O., Thirel, G., Dorchie, D., Perrin, C., Michel, C., 2021. airGR: Suite of GR Hydrological Models for Precipitation-Runoff Modelling. R package version 1.6.1. R News. <https://doi.org/10.15454/EX11NA>. <https://CRAN.R-project.org/package=airGR>.
- Coron, L., Thirel, G., Delaigue, O., Perrin, C., Andréassian, V., 2017. The suite of lumped GR hydrological models in an R package. *Environ. Model. Softw.* 94, 166–171. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2017.05.002>.
- Dairon, R., Dutertre, A., Tournébeze, J., Marks-Perreau, J., Carluher, N., 2017. Long-term impact of reduced tillage on water and pesticide flow in a drained context. *Environ. Sci. Pollut. Res.* 24 (8), 6866–6877. <https://doi.org/10.1007/s11356-016-8123-x>.
- De Marsily, G., 1986. *Quantitative Hydrogeology*. Academic Press, Inc, Orlando, FL, p. 464.
- Dooge, J.C.I., 1959. A general theory of the unit hydrograph. *J. Geophys. Res.* (1896–1977) 64 (2), 241–256. <https://doi.org/10.1029/JZ064i002p00241>.
- Dusek, J., Vogel, T., 2014. Modeling subsurface hillslope runoff dominated by preferential flow: one- vs. two-dimensional approximation. *vzj2013.05.0082(6)*. *Vadose Zone J.* 13. <https://doi.org/10.2136/vzj2013.05.0082>.
- Favot, J.C., Lesaffre, B., 1984. *Science du sol et drainage agricole, Livre jubilaire du cinquantenaire AFES (Association Française pour l'Etude du Sol) 1934-1984*. AFES, Paris 309–319.
- Gårdenäs, A.L., Šimůnek, J., Jarvis, N., Van Genuchten, M.T., 2006. Two-dimensional modelling of preferential water flow and pesticide transport from a tile-drained field, 2006 v.329 no.3-4(no. 3-4): pp. *J. Hydrol.* 329, 647–660. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2006.03.021>.
- Gatel, L., Lauvernet, C., Carluher, N., Weill, S., Tournébeze, J., Paniconi, C., 2019. Global evaluation and sensitivity analysis of a physically based flow and reactive transport model on a laboratory experiment. *Environ. Model. Softw.* 113, 73–83. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2018.12.006>.
- Gerke, H.H., Dusek, J., Vogel, T., 2013. Solute mass transfer effects in two-dimensional dual-permeability modeling of bromide leaching from a tile-drained field. *vzj2012.0091(2)*. *Vadose Zone J.* 12. <https://doi.org/10.2136/vzj2012.0091>.
- Gowda, P., Mulla, D., Desmond, E., Ward, A., Moriasi, D., 2012. ADAPT: model use, calibration and validation. *Trans. ASABE (Am. Soc. Agric. Biol. Eng.)* 55, 1345–1352. <https://doi.org/10.13031/2013.42246>.
- Gramlich, A., Stoll, S., Stamm, C., Walter, T., Prasuhn, V., 2018. Effects of artificial land drainage on hydrology, nutrient and pesticide fluxes from agricultural fields – a review. *Agric. Ecosyst. Environ.* 266, 84–99. <https://doi.org/10.1016/j.agee.2018.04.005>.
- Gupta, H.V., Kling, H., Yilmaz, K.K., Martinez, G.F., 2009. Decomposition of the mean squared error and NSE performance criteria: Implications for improving hydrological modelling. *J. Hydrol.* 377 (1), 80–91. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2009.08.003>.
- Guyon, G., 1963. Considérations sur l'hydraulique des nappes de drainage par canalisations souterraines.
- Guyon, G., Lesaffre, B., 1986. Mesures expérimentales au champ utilisées pour caractériser le fonctionnement hydraulique d'une réseau drainé en sol à pseudo-gley. *Zesz. Probl. Post. Nauk Rol.* 132, 187–215.
- Hansen, S., 1984. Estimation of potential and actual evapotranspiration: paper presented at the Nordic hydrological conference (Nybrog, Denmark, August - 1984). *Hydrol. Res.* 15 (4–5), 205–212. <https://doi.org/10.2166/nh.1984.0017>.
- Henine, H., Nédélec, Y., Ribstein, P., 2014. Coupled modelling of the effect of overpressure on water discharge in a tile drainage system. *J. Hydrol.* 511 (0), 39–48. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2013.12.016>.
- Hooghoudt, S.B., 1940. *General Consideration of the Problem of Field Drainage by Parallel Drains, Ditches, Watercourses, and Channels*. Bodemkundig Instituut, Groningen, Netherlands.
- Iooss, B., Lemaitre, P., 2015. A review on global sensitivity analysis methods. In: Meloni, C., Dellino, G. (Eds.), *Uncertainty management in Simulation-Optimization of Complex Systems: Algorithms and Applications*. Springer.
- Jacquart, C., Choisnel, E., 1995. Un modèle de bilan hydrique simplifié à deux utilisable en agrométéorologie, Association Météo et Climat.
- Jansen, M.J.W., 1999. Analysis of variance designs for model output. *Comput. Phys. Commun.* 117 (1), 35–43. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(98\)00154-4](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(98)00154-4).
- Jarvis, N., Larsbo, M., 2012. MACRO (v5.2): model use, calibration, and validation. *Trans. ASABE* 55 (4), 1413–1423. <https://doi.org/10.13031/2013.42251>.
- Kao, C., Nédélec, Y., Zimmer, D., 1998. Surface runoff mechanisms and modeling in subsurface drained fields. 7th International Drainage Symposium in the 21st Century: Food Production and the Environment., Orlando, USA, pp. 258–266, 8-10 March 1998.
- Kirkham, D., 1949. Flow of ponded water into drain tubes in soil overlying an impervious layer. *Eos Trans. Am. Geophys. Union* 30 (3), 369–385. <https://doi.org/10.1029/TR030i003p00369>.
- Klemes, V., 1986. Operational testing of hydrological simulation models, 1986 v.31 no.1 (no. 1): pp. *Hydrol. Sci. J.* 31, 13–24. <https://doi.org/10.1080/02626668609491024>.
- Knoben, W., Freer, J., Woods, R., 2019. Technical note: Inherent benchmark or not? Comparing Nash–Sutcliffe and Kling–Gupta efficiency scores. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 23, 4323–4331. <https://doi.org/10.5194/hess-23-4323-2019>.
- Kosugi, K., 1999. General model for unsaturated hydraulic conductivity for soils with lognormal pore-size distribution. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 63 (2), 270–277. <https://doi.org/10.2136/sssaj1999.03615995006300020003x>.
- Kristensen, K.J., Jensen, S.E., 1975. A model for estimating actual evapotranspiration from potential evapotranspiration. *Hydrol. Res.* 6 (3), 170–188. <https://doi.org/10.2166/nh.1975.0012>.
- Kroes, J.G., Van Dam, J.C., Groenendijk, P., Hendriks, R.F.A., Jacobs, C.M.J., 2008. *SWAP version 3.2. Theory Description and User Manual*, Alterra, Wageningen, Netherlands.
- Jones, R.L., Arnold, D.J.S., Harris, G.L., Bailey, S.W., Pepper, T.J., Mason, D.J., Brown, C. D., Leeds-Harrison, P.B., Walker, A., Bromilow, R.H., Brockie, D., Nicholls, P.H., Craven, A.C.C., Lythgo, C.M., 2000. Processes affecting movement of pesticides to drainage in cracking clay soils. *Pestic. Outlook* 11 (5), 174–179. <https://doi.org/10.1039/B007951K>.
- Lagacherie, P., 1987. Synthèse générale sur les études de secteur de référence drainage.
- Lesaffre, B., 1988. *Fonctionnement hydrologique et hydraulique du drainage souterrain des sols temporairement engorgés*. Thèse De. Dr. Thesis, Univ. Pierre Et. Marie Curie, Paris VI 334.
- Lesaffre, B., 1990. Field measurement of saturated hydraulic conductivity and drainable porosity using Guyon's pumping test. *Trans. ASAE* 33 (1), 173–178.
- Lesaffre, B., Morel, R., 1986. In: Van Wijk, A.L.M., Wesseling, J. (Eds.), *Use of Hydrographs to Survey Subsurface Drainage: Networks Ageing and Hydraulic Operating*. Symposium on Agricultural Water Management, Arnhem, NLD, pp. 175–189, 18-21 June 1985, pp.
- Lesaffre, B., Zimmer, D., 1987. Modélisation du comportement hydraulique d'un sol drainé: débits de pointe et tarissements. *Sci. du Sol.* 25 (4), 231–246.
- Lesaffre, B., Zimmer, D., 1988. Subsurface drainage peak flows in shallow soil. *J. Irrig. Drain. Eng.* 114 (3), 387–406.
- Lewan, E., Krueger, J., Jarvis, N., 2009. Implications of precipitation patterns and antecedent soil water content for leaching of pesticides from arable land. *Agric. Water Manag.* 96 (11), 1633–1640. <https://doi.org/10.1016/j.agwat.2009.06.006>.
- Lindstrom, G., Pers, C., Rosberg, J., Stromqvist, J., Arheimer, B., 2010. Development and testing of the HYPE (Hydrological Predictions for the Environment) water quality model for different spatial scales. *Hydrol. Res.* 41 (3–4), 295–319.
- Martinez, J.-M., 2011. *Analyse de sensibilité globale par décomposition de la variance*. Journée des GdR Ondes & Mascot Num, Institut Henri Poincaré., Paris.
- Mehdinejadani, B., Fathi, P., 2020. Analytical solutions of space fractional Boussinesq equation to simulate water table profiles between two parallel drainpipes under different initial conditions. *Agric. Water Manag.* 240, 106324. <https://doi.org/10.1016/j.agwat.2020.106324>.
- Milly, P.C.D., 1988. Advances in modeling of water in the unsaturated zone. *Transp. Porous Media* 3, 491–514.
- Moriasi, D.N., Gowda, P.H., Arnold, J.G., Mulla, D.J., Ale, S., Steiner, J.L., Tomer, M.D., 2013. Evaluation of the hooghoudt and kirkham tile drain equations in the soil and water assessment tool to simulate tile flow and nitrate-nitrogen. *J. Environ. Qual.* 42 (6), 1699–1710. <https://doi.org/10.2134/jeq2013.01.0018>.
- Moriasi, D.N., Rossi, C.G., Arnold, J.G., Tomer, M.D., 2012. Evaluating hydrology of the Soil and Water Assessment Tool (SWAT) with new tile drain equations. *J. Soil Water Conserv.* 67 (6), 513–524. <https://doi.org/10.2489/jswc.67.6.513>.
- Muñoz-Carpena, R., Zajac, Z., Kuo, Y.-M., 2007. Global sensitivity and uncertainty analyses of the water quality model VFSMOD-W. *Trans. ASABE* 50, 1732–1732. <https://doi.org/10.13031/2013.23967>.
- Musy, A., Higy, C., 2004. *Hydrologie 1: Une science de la nature*. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes. Lausanne 314.
- Nielsen, D.R., Th. Van Genuchten, M., Biggar, J.W., 1986. Water flow and solute transport processes in the unsaturated zone. *Water Resour. Res.* 22, 89S–108S.
- Niswonger, R.G., Prudic, D.E., Regan, R.S., 2006. *Documentation of the Unsaturated-Zone Flow (UZF1) Package for modeling Unsaturated Flow Between the Land Surface and the Water Table with MODFLOW-2005*. 6-A19. DOI:10.3133/tm6A19.
- Nimmo, J.R., 2005. Unsaturated Zone Flow Processes. In "Encyclopedia of Hydrological Sciences".

- Nolan, B.T., Dubus, I.G., Surdyk, N., Fowler, H.J., Burton, A., Hollis, J.M., Reichenberger, S., Jarvis, N.J., 2008. Identification of key climatic factors regulating the transport of pesticides in leaching and to tile drains. *Pest Manag. Sci.* 64 (9), 933–944. <https://doi.org/10.1002/ps.1587>.
- Pianosi, F., Beven, K., Freer, J., Hall, J.W., Rougier, J., Stephenson, D.B., Wagener, T., 2016. Sensitivity analysis of environmental models: a systematic review with practical workflow. *Environ. Model. Softw.* 79, 214–232.
- Pluer, W.T., Macrae, M., Buckley, A., Reid, K., 2020. Contribution of preferential flow to tile drainage varies spatially and temporally. *Vadose Zone J.* 19, e20043.
- Qi, H., Qi, Z., 2016. Simulating phosphorus loss to subsurface tile drainage flow: a review. *Environ. Rev.* 25, 150–162.
- Rawls, W.J., Brakensiek, D.L., 1982. Estimating soil water retention from soil properties. *J. Irrig. Drain. Div.* 108 (2), 166–171. <https://doi.org/10.1061/JRCEA4.0001383>.
- Ren, X.W., Santamarina, J.C., 2018. The hydraulic conductivity of sediments: a pore size perspective. *Eng. Geol.* 233, 48–54. <https://doi.org/10.1016/j.enggeo.2017.11.022>.
- Ritzema, H.P., 2016. Drain for Gain: Managing salinity in irrigated lands—A review. *Agric. Water Manag.* 176, 18–28. <https://doi.org/10.1016/j.agwat.2016.05.014>.
- Rousseva, S., et al., 2017. In: Banwart, S.A., Sparks, D.L. (Eds.), Chapter Two - Soil Water Characteristics of European SoilTrEC Critical Zone Observatories. *Advances in Agronomy*. Academic Press, pp. 29–72. <https://doi.org/10.1016/bs.agron.2016.10.004>.
- Rupp, D.E., Selker, J.S., 2005. Drainage of a horizontal Boussinesq aquifer with a power law hydraulic conductivity profile. *Water Resour. Res.* 41 (11) <https://doi.org/10.1029/2005wr004241>.
- Saltelli, A., 2002. Making best use of model evaluations to compute sensitivity indices. *Comput. Phys. Commun.* 145 (2), 280–297. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(02\)00280-1](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(02)00280-1).
- Saltelli, A., 2008. *Global Sensitivity Analysis: the Primer*. Wiley, Chichester.
- Saltelli, A., Tarantola, S., Campolongo, F., 2000. Sensitivity analysis as an ingredient of modeling. *statist. Sci.* 15, 377–395.
- Schaap, M.G., van Genuchten, M.T., 2006. A modified Mualem–van genuchten formulation for improved description of the hydraulic conductivity near saturation. *Vadose Zone J.* 5 (1), 27–34. <https://doi.org/10.2136/vzj2005.0005>.
- Shokri, A., Bardsley, W.E., 2016. Development, testing and application of DrainFlow: a fully distributed integrated surface–subsurface flow model for drainage study. *Adv. Water Resour.* 92, 299–315. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2016.04.013>.
- Šimůnek, J., Bradford, S.A., 2008. *Vadose Zone Modeling: Introduction and Importance*. All rights reserved. No part of this periodical may be reproduced or transmitted in any form or by any means, electronic or mechanical, including photocopying, recording, or any information storage and retrieval system, without permission in writing from the publisher. *Vadose Zone J.* 7, 581–586.
- Skaggs, R.W., 1980. *Drainmod reference report. Methods for design and evaluation of drainage-water management systems for soils with high water tables*. United States Department of Agriculture. North Carolina state University, Raleigh, North Carolina.
- Sobol, I.M., 1993. Sensitivity analysis for non-linear mathematical models. *Math. Model. Comput. Exp.* 1, 407–414.
- Stillman, J.S., Haws, N.W., Govindaraju, R.S., Suresh, C., Rao, P., 2006. A semi-analytical model for transient flow to a subsurface tile drain. *J. Hydrol.* 317 (1–2), 49–62.
- Suleiman, A.A., Ritchie, J., 2001. Estimating saturated hydraulic conductivity from soil porosity. *Trans. ASAE* 44 (2), 235. <https://doi.org/10.13031/2013.4683>.
- Tissot, J.Y., Prieur, C., 2015. A randomized orthogonal array-based procedure for the estimation of first- and second-order Sobol' indices. *J. Stat. Comput. Simul.* 85 (7), 1358–1381. <https://doi.org/10.1080/00949655.2014.971799>.
- Tournebise, J., Kao, C., Nikolic, N., Zimmer, D., 2004. Adaptation of the STICS model to subsurface drained soils. *Agronomie* 24 (6–7), 305–313.
- Trajanov, A., Kuzmanovski, V., Leprince, F., Real, B., Dutertre, A., Maillat-Mezerey, J., Džeroski, S., Debeljak, M., 2015. Estimating drainage periods for agricultural fields from measured data: data-mining methodology and a case study (La Jaillière, France). *Irrig. Drain.* 64 (5), 703–716. <https://doi.org/10.1002/ird.1933>.
- Trajanov, A., Kuzmanovski, V., Real, B., Perreau, J.M., Džeroski, S., Debeljak, M., 2018. Modeling the risk of water pollution by pesticides from imbalanced data. *Environ. Sci. Pollut. Res. Int.* 25 (19), 18781–18792. <https://doi.org/10.1007/s11356-018-2099-7>.
- Van Der Ploeg, R.R., Horton, R., Kirkham, D., 1999. *Steady Flow to Drains and Wells*. In: Skaggs, R.W., Schilfgaarde, J.V. (Eds.), *Agricultural Drainage*. Agronomy. American Society of Agronomy, Inc. Crop Science Society of America, Inc. Soil Science Society of America, Inc., Madison, Wisconsin, USA, pp. 213–263.
- Van Schilfgaarde, J., 1963. Design of tile drainage for falling water tables. *J. Irrig. Drain. Div.* 89 (2), 1–12.
- Vidal, J.-P., Martin, E., Franchistéguy, L., Baillon, M., Soubeyroux, J.-M., 2010. A 50-year high-resolution atmospheric reanalysis over France with the Safran system. *Int. J. Climatol.* 30 (11), 1627–1644. <https://doi.org/10.1002/joc.2003>.
- Vincent, B., 2020. TPincipes techniques et chiffres du drainage agricole De la tuyautique à l'hydro-diplomatie. *Sci. Eaux Territ.* 32, 8–15. <https://doi.org/10.14758/set-revue.2020.2.02>.
- Van Genuchten, M.T., Jury, W.A., 1987. Progress in unsaturated flow and transport modeling. *Rev. Geophys.* 25, 135–140.
- Willkommen, S., Pfannerstill, M., Ulrich, U., Guse, B., Fohrer, N., 2019. How weather conditions and physico-chemical properties control the leaching of flufenacet, diflufenican, and pendimethalin in a tile-drained landscape. *Agric., Ecosyst. Environ.* 278, 107–116.
- Wilson, G.L., Mulla, D.J., Galzki, J., Laacouri, A., Vetsch, J., Sands, G., 2020. Effects of fertilizer timing and variable rate N on nitrate–N losses from a tile drained corn-soybean rotation simulated using DRAINMOD-NII. *Precis. Agric.* 21 (2), 311–323. <https://doi.org/10.1007/s11119-019-09668-4>.
- Youngs, E.G., 1966. Horizontal seepage through unconfined aquifers with non-uniform hydraulic conductivity. *J. Hydrol.* 4 (C), 91–97.
- Youngs, E.G., 1980. The analysis of groundwater seepage in heterogeneous aquifers / Analyse de l'infiltration des eaux souterraines dans les aquifères hétérogènes. *Hydrol. Sci. Bull.* 25, 155–165.
- Zhang, W., Zhang, Y., 1986. *Methods for Estimating the Drainable Porosity in Nonsteady Drainage Formulas*. Hydraulic Design in Water Resources Engineering: Land Drainage. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, pp. 373–382.
- Zimmer, D., 1992. Drainage flow patterns and modeling in a seasonally waterlogged heavy clay soil. 6th International Drainage Symposium. Drainage and Water Table Control, Nashville, USA, pp. 80–87, 13–15 December 1992.
- Zimmer, D., Lesaffre, B., 1989. Subsurface drainage flow patterns and soil types. *ASAE-CSAE International Summer Meeting*, Québec, CAN, p. 17, 25–28 June 1989.
- Zimmer, D., Lorre, E., Lesaffre, B., 1995. Parameter sensitivity and field evaluation of SIDRA model. *Irrig. Drain. Syst.* 9 (3), 279–296.