



HAL
open science

Développement du modèle hydrologique intégré NIHM : implémentation des processus de transport

Mouna Chaguer

► **To cite this version:**

Mouna Chaguer. Développement du modèle hydrologique intégré NIHM : implémentation des processus de transport. Sciences de la Terre. Université de Strasbourg, 2022. Français. NNT : 2022STRAH006 . tel-04016283

HAL Id: tel-04016283

<https://theses.hal.science/tel-04016283v1>

Submitted on 6 Mar 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.

ÉCOLE DOCTORALE 413 : Science de la Terre et de l'Environnement
Institut Terre et Environnement de Strasbourg

THÈSE présentée par :

Mouna CHAGUER

soutenue le : 27 Septembre 2022

pour obtenir le grade de : **Docteur de l'université de Strasbourg**

Discipline/ Spécialité : Sciences de la Terre et de l'Univers / Géophysique

**Développement du modèle hydrologique
intégré NIHM
Implémentation des processus de transport**

THÈSE dirigée par :

M. DELAY Frederick

Professeur, Université de Strasbourg

THÈSE co-encadrée par :

M. WEILL Sylvain

Maître de conférences, ENGEEES

RAPPORTEURS :

M. NOETINGER Benoît

Directeur expert IFPEN, Institut Français du Pétrole Energies Nouvelles

Mme. ROSIER Carole

Professeur, ULCO Université du Littoral Côte d'Opale

AUTRES MEMBRES DU JURY :

Mme. LAUVERNET Claire

Chargée de recherches, INRAE

Mme. RIVIERE Agnès

Chargée de recherches, Mines Paris Tech, Centre de Geosciences

Remerciements

Je tiens d'abords à exprimer ma sincère gratitude et mes remerciements à mon directeur de thèse, M. Frederick Delay et à mon co-encadrant M. Sylvain Weill. Frederick, Sylvain, je vous remercie de m'avoir donné la chance de découvrir le monde de la recherche et de la modélisation numérique. Je vous suis infiniment reconnaissante pour votre disponibilité et pour votre soutien tout au long de ce projet de thèse. Je ne vous remercierai jamais assez pour vos conseils inestimables, pour la qualité de nos échanges et pour vos relectures. Ce fût un très grand plaisir de travailler avec vous.

Je tiens particulièrement à remercier M. Philippe Ackerer pour le temps qu'il a consacré à m'accompagner dans ce travail de thèse. Philippe, merci du fond du cœur de m'avoir apporté beaucoup d'aide technique avec tant de gentillesse et de pédagogie. Ta maîtrise de la modélisation hydrogéologique a permis à ce projet de thèse d'avancer et d'évoluer dans le bon sens.

Je tiens également à remercier chaleureusement mes camarades et amis d'ITES (ex LHyGeS) et de l'EOST. Merci Dimitri, Wafae, Sara, Daniel, Tetyana, Maria, Tobias, Adrien, David, Oscar et à tous ceux que j'ai eu la chance de croiser pendant cette aventure. Merci pour les moments formidables et les rigolades qu'on a partagé ensemble et pour toutes nos discussions enrichissantes. Ces moments de bonheur vont trop me manquer.

Je tiens à étendre mes remerciements à M. Marwan Fahs, M. Benjamin Belfort, M. François Lehmann et à toute l'équipe TRHyCo pour leur soutien et leur bienveillance.

Un merci tout spécial à mes parents et à ma famille. Les mots ne peuvent exprimer à quel point je suis reconnaissante envers vous. Je tiens à vous dire merci infiniment pour votre amour inconditionnel et pour m'avoir soutenue et encouragée dans tous mes choix.

Enfin, j'exprime toute ma reconnaissance aux personnes qui ont accepté d'être membres du jury : M. NOETINGER Benoît, Directeur Expert à l'IFPEN, Mme. ROSIER Carole, Directrice de Recherches de l'ULCO, Mme. LAUVERNET Claire, Chargée de Recherches à l'INRAE, et Mme. RIVIERE Agnès, Chargée de Recherches à Mines Paris Tech.

Table des matières

Remerciements	2
Table des matières	3
Liste des figures	6
Liste des tableaux	9
Résumé étendu	10
Chapitre 1 : Introduction générale	16
1.1. Les différentes catégories de modèles hydrologiques	16
1.1.1. Classification selon la nature des variables décrivant les processus du système	17
1.1.2. Classification selon la nature des relations utilisées pour le formalisme des processus	17
1.1.3. Classification selon l'échelle spatio-temporelle	17
1.2. La modélisation hydrologique intégrée du cycle de l'eau	19
1.2.1. Origines de la modélisation hydrologique intégrée	19
1.2.2. Avancées de la modélisation hydrologique intégrée	20
1.2.2.1. Avancées dans la compréhension des processus de genèse de ruissellement	20
1.2.2.2. Evolution des outils numériques	21
1.2.2.3. Développement des premiers modèles intégrés	22
1.2.2.4. Les différentes stratégies de couplage entre les écoulements de surface et souterrain	23
1.2.2.5. Champs d'application classiques et émergents des modèles hydrologiques intégrés	24
1.3. La modélisation hydrologique intégrée des processus de transport des solutés	26
1.3.1. Les différentes méthodes de résolution numériques du système couplé	28
1.3.2. Intégration du transfert de solutés et champs d'application	29
1.4. La modélisation hydrologique intégrée dite « à dimension réduite »	31
1.5. Objectifs du projet de thèse	33
Chapitre 2 : Matériels et méthodes	35
2.1. Outils de modélisation	35
2.1.1. Le modèle d'écoulement NIHM	35
2.1.1.1. Modèle souterrain à dimension réduite	35
2.1.1.2. Le modèle de ruissellement de surface 2-D	41
2.1.1.3. Couplage surface-subsurface des écoulements d'eau	43

2.1.1.4. Discrétisation et résolution numérique.....	44
2.1.2. Le modèle TRACES.....	45
2.1.2.1. Le modèle d'écoulement	45
2.1.2.2. Le modèle de transport des solutés	46
2.1.2.3. Résolution numérique	49
2.2. Construction du modèle de transport intégré à dimension réduite couplé surface- subsurface	50
2.2.1. Les étapes de la construction du modèle de transport non réactif NIHM-T	51
2.2.2. Modèle de transport de solutés en subsurface à dimension réduite	52
2.2.2.1. Equations de base du modèle de transport	52
2.2.2.2. Résolution numérique de l'équation d'advection-dispersion en subsurface dans NIHM-T	53
2.2.2.3. Stratégie de couplage de NIHM et du module transport de TRACES.....	57
2.2.3. Implémentation du modèle de transport de solutés en surface.....	58
2.2.4. Développement du modèle de transport à dimension réduite couplé surface- subsurface.....	59
2.3. Bilan sur l'implémentation du module de transport dans le modèle hydrologique intégré à dimension réduite	62
Chapitre 3 : Evaluation du modèle de subsurface à dimension réduite.....	63
3.1. Outils d'étude du transport de solutés et d'évaluation de la performance du modèle	63
3.1.1. Evolution du panache de soluté dans le temps	64
3.1.2. Analyse des moments.....	65
3.2. Tests synthétiques.....	66
3.2.1. Cas tests du pavé régulier.....	67
3.2.1.1 Géométrie et maillage	67
3.2.1.2. Description des paramètres	68
3.2.1.3. Les différents scénarios considérés	72
3.2.2. Cas test du convergent hétérogène à fond bosselé et incliné	75
3.2.2.1. Géométrie et maillage	75
3.2.2.2. Champ de conductivité hydraulique.....	76
3.2.2.3. Conditions aux limites et initiales	77
3.3. Résultats et discussion.....	78

3.4. Bilan.....	94
Chapitre 4 : Modèle couplé à dimension réduite NIHM-T	97
4.1. Evaluation du modèle couplé à dimension réduite NIHM-T	97
4.1.1. Cas test convergent hétérogène	100
4.1.1.1. Description du domaine	100
4.1.1.2. Analyse du transfert des solutés non réactifs	102
4.2. Application du modèle couplé à dimension réduite NIHM-T : L'île du Rohrschollen	105
4.2.1. Présentation du site et description du domaine	105
4.2.2. Scénario de la modélisation du problème d'écoulement.....	108
4.2.3. Scénario de la modélisation du problème de transport.....	112
4.3. Bilan.....	117
Récapitulatif et perspectives.....	118
Bibliographie.....	123

Liste des figures

Figure 2.1 : Formalisme adopté pour la réduction de dimensionnalité dans le compartiment souterrain de NHIM. z_b , z_w , et z_s sont les coordonnées dans la direction z normale au substratum de la nappe, du niveau du substratum, du niveau de nappe, et de la côte topographique. z'_b , z'_w , et z'_s sont les coordonnées dans la direction z' verticale, du niveau du substratum, du niveau de nappe, et de la côte topographique (Jeannot et al., 2018).	37
Figure 2.2 : Schéma représentant l’algorithme de calcul du modèle NIHM-T et la stratégie de couplage surface-subsurface.....	61
Figure 3.1 : Géométrie du modèle et champ de conductivité hydraulique associé de la subsurface.....	68
Figure 3.2 : Représentation du milieu binaire et du contraste entre les zones d’hétérogénéité k^+ et k^-	69
Figure 3.3 : Coupe horizontale des conditions aux limites pour le scénario saturé (S1). Les étoiles indiquent les emplacements utilisés pour comparer les courbes de restitution à partir des résultats de la simulation de transport.	73
Figure 3.4 : Coupe transversale verticale du domaine avec les conditions aux limites (charges imposées H1 et H2) pour simuler l'écoulement non saturé et le transport de soluté - scénarios S2 et S3.....	74
Figure 3.5 : Coupe transversale verticale du domaine avec les conditions aux limites (charges imposées H1 et H2) pour simuler l'écoulement non saturé et le transport de soluté - scénarios S4 et S5.....	75
Figure 3.6 : Configuration géométrique du domaine convergent irrégulier	76
Figure 3.7 : Champ de conductivité hydraulique à saturation dans le compartiment souterrain associé au domaine convergent irrégulier (le triangle noir comme trace en surface du domaine)	77
Figure 3.8 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario S1.	79
Figure 3.9 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario S1.	80
Figure 3.10 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario S2.	81

Figure 3.11 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario S2.	82
Figure 3.12 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario S3.	82
Figure 3.13 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario S3.	83
Figure 3.14 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario SB1.	84
Figure 3.15 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario SB1.	85
Figure 3.16 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario SB2.	86
Figure 3.17 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario SB2.	86
Figure 3.18 : (a)-Vues horizontales du panache de soluté 2-D simulé par le modèle NIHM-T. (b)- Coupes transversales verticales à travers le panache de soluté 3-D simulé par le modèle complet TRACES 3-D – scénario S2.	87
Figure 3.19 : (a)-Vues horizontales du panache de soluté 2-D simulé par le modèle NIHM-T. (b)- Coupes transversales verticales à travers le panache de soluté 3-D simulé par le modèle complet TRACES 3-D – scénario S3.	87
Figure 3.20 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario S4.	88
Figure 3.21 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario S4.	89
Figure 3.22 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario SB3.	89
Figure 3.23 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario SB3.	90
Figure 3.24 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario S5.	91
Figure 3.25 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario S5.	91

Figure 3.26 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario S6.	92
Figure 3.27 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario S6.	93
Figure 4.1 : Configuration géométrique du cas test convergent hétérogène et champ de conductivité hydraulique à saturation dans le compartiment souterrain (le triangle noir comme trace en surface du domaine).	101
Figure 4.2 : Evolution en fonction du temps des flux à l'exutoire - cas test convergent (S9).	103
Figure 4.3 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations aux emplacements P5 et P6 - cas test convergent (S9).	104
Figure 4.4 : Carte de présentation de la zone d'étude – île du Rohrschollen.	106
Figure 4.5 : Présentation des points d'observations hydrologiques sur l'île du Rohrschollen et d'un des scénarios tests de réponse de l'île à une injection « type » dans le canal d'entrée. Modifié de Jeannot et al. (2018).	108
Figure 4.6 : Piézométrie simulée par NIHM en fonction de la piézométrie mesurée correspondante, pour tous les piézomètres du projet LIFE+ de l'île du Rohrschollen, pendant la période de calibration. Jeannot et al. (2018).	111
Figure 4.7 : Distribution spatiale de la concentration de solutés dans la lame d'eau de surface dans l'île du Rohrschollen à 3 temps de la période de calibration.	114
Figure 4.8 : Evolution temporelle des concentrations de solutés pour 4 piézomètres de l'île du Rohrschollen.	115
Figure 4.9 : Distribution spatiale de la concentration de solutés dans le compartiment souterrain de l'île du Rohrschollen à 3 temps de la période de calibration.	116

Liste des tableaux

Tableau 3.1. Conditions d'écoulement et de transport de solutés dans un pavé régulier hétérogène	70
Tableau 3.2. Conditions d'écoulement et de transport de solutés dans un milieu souterrain binaire.....	71
Tableau 3.3. Conditions d'écoulement et de transport de solutés dans un convergent hétérogène à fond bosselé et incliné	78
Tableau 3.4. Comparaison des valeurs du temps CPU en minutes enregistrées pour les simulations d'écoulement et de transport de soluté.	94

Résumé étendu

Contexte et outils de modélisation

Les processus de transfert de solutés dans les systèmes hydrologiques sont complexes, et impliquent souvent de multiples interactions à des échelles de temps et d'espace différentes entre les différents compartiments du système. Parallèlement, la modélisation hydrologique distribuée devient un outil de plus en plus utilisé et en pleine évolution. Les modèles dits intégrés représentent la dynamique du système complet (écoulements de surface et de sub-surface) en prenant en compte les différents processus en jeu et leurs interactions. Ils s'avèrent aujourd'hui indispensable pour examiner les défis environnementaux et mieux prédire et gérer la qualité des eaux. Toutefois, peu de modèles intégrés introduisent les processus de transport dans leurs options de simulation.

Les modèles de transport de soluté sont généralement basés sur la résolution de l'équation d'advection-dispersion 3-D et sont fréquemment confrontés à plusieurs problèmes numériques, en plus d'un coût calcul élevé. L'objectif du travail de thèse est de répondre au besoin de développer des modèles intégrés de transfert de solutés performants et moins coûteux, en implémentant des processus de transport dans le modèle hydrologique intégré NIHM, lui-même parcimonieux (Pan et al., 2015 ; Weill et al., 2017 ; Jeannot et al., 2018, 2019). Cette implémentation devra tenir compte puis simuler les interactions à l'interface surface-subsurface.

Le modèle hydrologique NIHM (Normally Integrated Hydrological Model) se caractérise par un modèle souterrain dit à dimension réduite 2-D couplé à un écoulement de surface 2-D et à un écoulement en chenaux 1-D. La faible dimensionnalité dans le compartiment souterrain est le résultat d'une intégration le long de la direction locale normale au substratum de l'aquifère, ce qui permet de réduire significativement le nombre de paramètres requis pour réaliser les simulations, et par conséquent de gagner énormément en temps de calcul.

L'implémentation numérique du transport dans les fonctionnalités du modèle est inspirée du modèle avancé TRACES et consiste à coupler de manière non intrusive le modèle NIHM et un module de transport de soluté 2-D hérité de TRACES. Dans le cadre de cette thèse, un premier développement des modules de transfert de soluté en sub-surface à dimension

réduite a été réalisé, suivi d'une mise en place du module de transport en surface (ruissellement diffus et routage préférentiel). Ensuite, les interactions entre les deux compartiments ont été implémentées. L'approche a d'abord été évaluée sur des cas tests synthétiques ne comportant que le milieu souterrain, cherchant ainsi à évaluer l'influence de l'intégration des écoulements souterrains, donc le passage 3-D vers le 2-D, sur les simulations du transport. Puis, l'efficacité du modèle couplé surface-subsurface a été examinée, toujours sur un cas synthétique à géométrie complexe et en le comparant à un modèle de référence. Enfin, le modèle NIHM-T a été appliqué pour décrire le transport de solutés sur l'Île du Rohrschollen.

Applications

Le modèle de transport a été testé sur plusieurs scénarios pour l'évaluer dans différentes conditions de fonctionnement hydrologique. La comparaison à des modèles tridimensionnels complets montre que la réduction de dimensionnalité du problème par intégration des écoulements est le plus souvent appropriée également pour les problèmes de transport de soluté.

Le gain en coût calcul reste conséquent, ce qui ouvre la porte à des applications usuellement « lourdes » d'analyse quantitative de la gestion de la qualité des eaux sur un bassin versant (Chaguer et al., 2022). Ces différents tests ne sont pas discutés ici. On présente uniquement le cas d'une application sur un bassin versant réel : L'île du Rohrschollen.

Il s'agit d'une île fluviale du Rhin, en partie remodelée avec l'aménagement passé du fleuve pour lutter contre les inondations et développer la navigation et l'agriculture. Cet aménagement est à l'origine d'une déconnexion hydrologique entre le réseau hydrographique principal parcourant l'île (le Bauerngrundwasser-BGW) et le canal du Rhin. Afin de restaurer une partie de la dynamique ancienne du système, et dans le cadre d'un projet LIFE+, l'eau du Rhin est aujourd'hui re-injectée par une vanne dans un nouveau canal artificiel de 900 m de long, construit au sud de l'île et traversant le BGW (figure 1). Le débit d'écoulement de surface imposé varie entre une valeur de base de 2 m³/s et une valeur maximale de 80 m³/s.

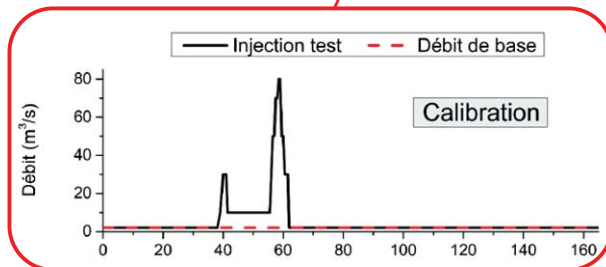
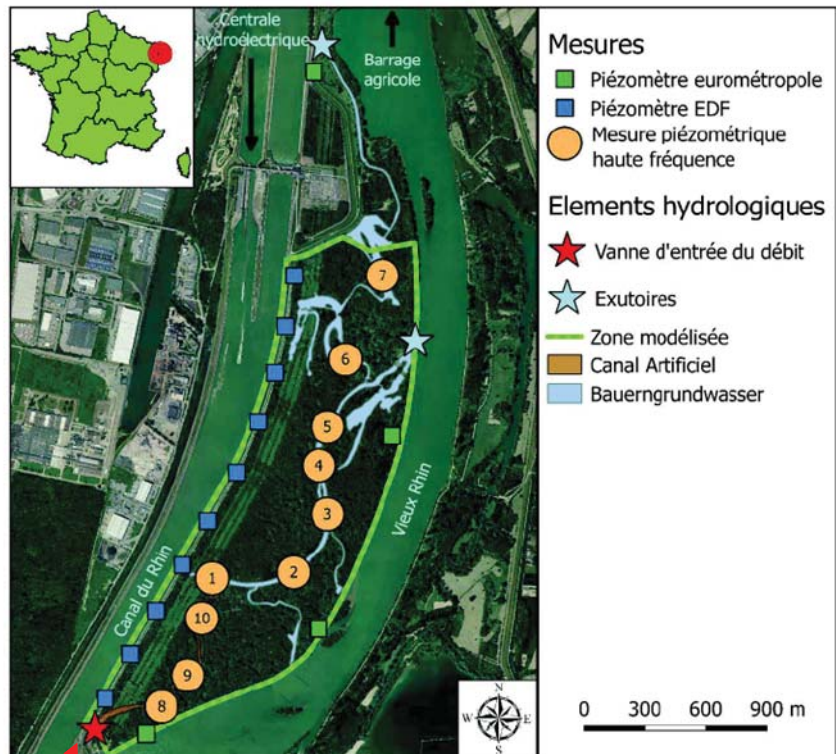


Figure 1. Présentation des points d'observations hydrologiques sur l'île de Rohrschollen et d'un des scénarios tests de réponse de l'île à une injection « type » dans le canal d'entrée. Modifié de Jeannot et al. (2018)

Un suivi à haute résolution temporelle a été réalisé à partir d'un réseau de piézomètres mis en place le long du BGW et du canal artificiel (fig. 1). Avec les données de terrain et les mesures de piézométries transmises, Jeannot et al. (2018) ont calibré le modèle NIHM sur une période de forte injection de débit dans le canal artificiel. A partir de ce modèle calibré, le modèle de transport a été appliqué à cet hydrosystème.

A partir d'injections de soluté en surface, le modèle intégré NIHM-T a permis d'identifier le transfert des concentrations de soluté en sub-surface depuis la surface et donc la présence des interactions surface/souterrain (figure 2). Les solutés apparaissent plus concentrés en dessous des zones humides en raison de l'infiltration rapide et importante des eaux de surface riches en solutés vers la nappe, suite aux injections forcées. Les deux compartiments sont donc très réactifs en réponse aux injections et les résultats confirment que l'infiltration est le mécanisme majoritaire d'échanges surface/souterrain sur l'île restauré du Rohrschollen.

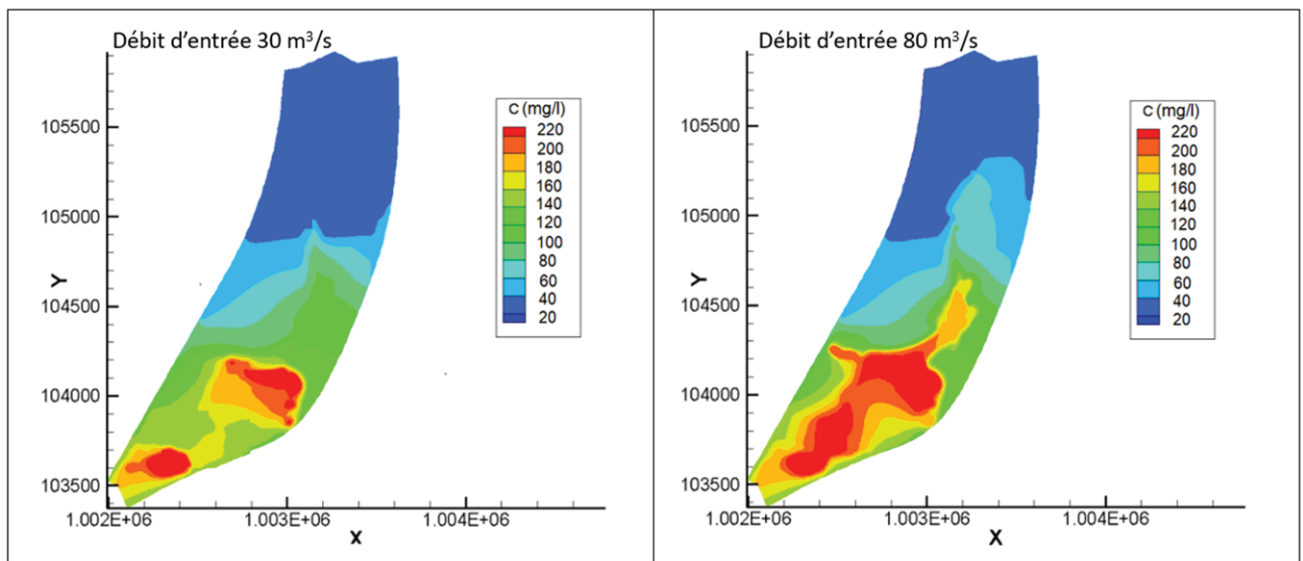


Figure 2. Distribution spatiale de la concentration du soluté dans le compartiment souterrain de l'île du Rohrschollen simulée par NIHM-T, à deux temps de la période de calibration

Références citées

- Chaguer, M., Weill, S., Ackerer, P., Delay, F., 2022. Implementation of subsurface transport processes in the low-dimensional integrated hydrological model NIHM. *Journal of Hydrology* 609, 127696. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2022.127696>
- Jeannot, B., Weill, S., Eschbach, D., Schmitt, L., Delay, F., 2019. Assessing the effect of flood restoration on surface–subsurface interactions in Rohrschollen Island (Upper Rhine river – France) using integrated hydrological modeling and thermal infrared imaging.

- Hydrol. Earth Syst. Sci. 23, 239–254. <https://doi.org/10.5194/hess-23-239-2019>
- Jeannot, B., Weill, S., Eschbach, D., Schmitt, L., Delay, F., 2018. A low-dimensional integrated subsurface hydrological model coupled with 2-D overland flow: Application to a restored fluvial hydrosystem (Upper Rhine River – France). *Journal of Hydrology* 563, 495–509. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2018.06.028>
- Pan, Y., Weill, S., Ackerer, P., Delay, F., 2015. A coupled stream flow and depth-integrated subsurface flow model for catchment hydrology. *J. Hydrol.* 530, 66–78. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2015.09.044>
- Weill, S., Delay, F., Pan, Y., Ackerer, P., 2017. A low-dimensional subsurface model for saturated and unsaturated flow processes: ability to address heterogeneity. *Comput. Geosci.* 21, 301–314. <https://doi.org/10.1007/s10596-017-9613-8>

Chapitre 1 : Introduction générale

1.1. Les différentes catégories de modèles hydrologiques

La modélisation hydrologique est en pleine évolution et s'avère indispensable pour comprendre et interpréter le fonctionnement des bassins versants, dans le cadre des problématiques liées à la gestion quantitative et qualitative des ressources en eau et à la prévention des risques hydrologiques. La modélisation hydrologique simplifie un système complexe en traduisant les différents processus de transferts en équations mathématiques. La complexité des systèmes hydrologiques réels suppose généralement la mise en place de nouvelles approximations à chaque stade de la modélisation, dès la perception et la formalisation du phénomène jusqu'à sa traduction en un logiciel (Ambroise, 1999). Plusieurs modèles hydrologiques existent dans la littérature et chaque modèle est destiné à un domaine d'application spécifique privilégié selon son objectif et les hypothèses sur lesquelles il se base. Les limites du champ de validité d'un modèle reposent généralement sur le choix des approximations.

L'intérêt porté pour la modélisation hydrologique distribuée à base physique remonte aux travaux de Freeze et Harlan (1969). Depuis, une variété de modèles hydrologiques a été développée (e.g. ; Clarke, 1973; Haan et al., 1982; Morel-Seytoux, 1989; Bowles et O'Connell, 1991; Singh, 1995; Singh and Woolhiser, 2002) et un effort important de développement des techniques de modélisation a été réalisé, soutenu par le progrès informatique. L'ensemble a permis d'étendre considérablement l'usage de la modélisation numérique à de nombreux domaines (e.g. ; Paniconi and Putti, 2015 ; Fatichi et al, 2016 ; Simmons et al, 2019). Avant de s'attarder sur la modélisation hydrologique intégrée à base physique, il est utile de présenter les différentes classes de modèles hydrologiques. Il existe dans la littérature de nombreuses classifications de modèles qui reposent sur des critères différents (e.g. ; Singh, 1995; Refsgaard et Storm, 1996; Chocat, 1997; Ambroise, 1999). La terminologie n'est pas toujours exempte d'ambiguïté et engendre une certaine confusion (e.g.; Hrachowitz and Clark, 2017).

Singh (1995) classe les modèles selon trois critères qui sont : la nature des variables décrivant les processus du système, la nature des relations utilisées et l'échelle spatio-temporelle.

1.1.1. Classification selon la nature des variables décrivant les processus du système

Selon la nature des variables et des paramètres utilisés, le modèle peut être **déterministe** ou **stochastique**. Dans un modèle déterministe, les variables d'entrée et les paramètres du système ne sont pas aléatoires mais plutôt complètement déterminés ou déterminables. Par opposition, dans un modèle stochastique, ces grandeurs s'appuient sur des distributions de probabilité. Les modèles déterministes constituent une grande partie des modèles existants. La simulation de modèles stochastiques, nécessite le recours à des variables aléatoires et concerne majoritairement l'étude des phénomènes aléatoires, mal déterminés sur les variables qui conditionnent le phénomène, ou encore difficilement expliqués d'un point de vue physique (Chocat, 1997).

1.1.2. Classification selon la nature des relations utilisées pour le formalisme des processus

Selon la nature des relations utilisées pour résoudre le système, nous distinguons les modèles **empiriques**, les modèles **conceptuels** et les modèles **à base physique**. Dans un modèle empirique, les variables d'entrée et de sortie sont reliées par des fonctions mathématiques fondées sur l'exploitation d'expérimentations et des observations qui en découlent. La formulation du modèle est généralement simple mais se limite souvent à des conditions expérimentales spécifiques. Le jeu de paramètres du modèle empirique doit être déterminé par un processus de calage qui consiste à sélectionner celui qui s'ajuste le mieux aux données mesurées. Les modèles conceptuels sont des représentations explicites de phénomènes. Les modèles hydrologiques conceptuels représentent le fonctionnement du bassin versant par des analogies et l'assimilent souvent à un assemblage de réservoirs interconnectés pour décrire les processus de transferts entre compartiments. Les modèles à base physique s'appuient sur les équations qui décrivent des lois physiques pour représenter le fonctionnement du système étudié et permettre une description « théorique » des processus.

1.1.3. Classification selon l'échelle spatio-temporelle

Selon l'unité spatiale de base dans les équations, nous différencions trois groupes de modèles : les modèles **globaux**, les modèles **distribués** et les modèles **semi-distribués**. Dans

un modèle global, le bassin est considéré comme une entité unique et les processus sont décrits par des équations simplifiées ou issues d'observations ne prenant pas en compte la variabilité spatiale au sein du système. Les modèles distribués prennent explicitement en compte la variabilité spatiale des variables d'entrées, des conditions aux limites et des caractéristiques du bassin versant à l'aide de mosaïques d'unités spatiales supposées homogènes. Ces modèles spatialisés sont capables d'étudier l'évolution du système et de capturer l'impact de la variabilité spatiale des différents facteurs sur la réponse du bassin versant. Dans la pratique, la modélisation hydrologique distribuée exige une connaissance détaillée du bassin versant et risque de faire face à des problèmes de surparamétrisation et de calage. Les modèles sont dits semi-distribués quand certains composants du système peuvent être globalisés à une échelle intermédiaire – comme celle des sous-bassins versants d'un bassin plus grand.

L'évolution temporelle permet de distinguer les modèles **événementiels** et les modèles **continus**. Un modèle événementiel permet de reproduire le comportement du bassin uniquement pour des événements particuliers à savoir les épisodes de crues et exige de pouvoir déterminer l'état initial du bassin avec précision. Un modèle continu vise à suivre l'évolution des variables d'entrée et de sortie à plus long terme y compris lors de périodes hors événements. Par conséquent, certains processus ne peuvent plus être négligés et nécessitent plus de paramètres pour capturer l'évolution sur une ou plusieurs années.

L'intégration de l'ensemble des trois critères dans la modélisation n'a pas encore été pleinement examiné par la communauté de recherche. Dans la littérature, il existe principalement des modèles empiriques globaux, des modèles conceptuels globaux ou distribués et des modèles distribués à base physique. Les modèles empiriques globaux sont très utiles et utilisés en ingénierie. Ils donnent de bonnes simulations avec très peu de paramètres et une mise en œuvre assez simple. Ils dépendent largement des données utilisées pour les établir, et perdent leur utilité pour des analyses en dehors de ce domaine d'observation. Généralement basés sur la théorie des systèmes linéaires, ils ne conviennent pas à l'étude des réponses hydrologiques fortement non linéaires. Les modèles conceptuels globaux sont simples à manipuler et utiles pour simuler toutes les composantes du cycle de l'eau. Néanmoins, en raison de leur calage communément sur les seuls débits, leur simulation des autres variables hydrologiques est entachée d'une forte incertitude.

Les modèles conceptuels distribués représentent un grand progrès comparé aux modèles conceptuels globaux en termes d'analyse du fonctionnement interne d'un bassin par suite d'une prise en compte meilleure de la structure du système. Cependant, ils exigent un nombre important de données et une mise en œuvre plus lourde.

Les modèles hydrologiques distribués à base physique font appel à des variables d'état reliées entre elles en tout point par des relations d'état, des relations dynamiques et des relations de conservation (bilans de masse, d'énergie, de quantité de mouvement...), exprimées sous forme d'équations aux dérivées partielles. Il s'agit de modèles complexes et lourds à utiliser, qui sollicitent un grand nombre de données à collecter et des ressources de calcul importantes. Toutefois, ces modèles apportent des explications physiques au lieu de représentations simplifiées du fonctionnement du bassin et permettent le suivi de l'évolution du système en tout point et tout instant et le couplage avec les autres flux associés à l'eau.

Les modèles hydrologiques intégrés sont une nouvelle génération des modèles hydrologiques distribués à base physique qui ont la spécificité de prendre en compte les processus hydrologiques et l'ensemble de leurs interactions dans tous les compartiments du cycle de l'eau continental.

1.2. La modélisation hydrologique intégrée du cycle de l'eau

1.2.1. Origines de la modélisation hydrologique intégrée

Freeze et Harlan (1969) sont les premiers à avoir formalisé la modélisation hydrologique intégrée. Ils mènent en 1969 une investigation des systèmes hydrologiques et soulèvent plusieurs questions méthodologiques liées au développement de modèles hydrologiques de bassins. Ces problématiques identifiées sont toujours au cœur des travaux de recherches et ont beaucoup contribué à l'avancée des connaissances fondamentales sur les processus, des méthodes numériques et des techniques de calcul. Freeze et Harlan décrivent le cycle hydrologique comme un système dynamique soumis à un ensemble de contraintes ou de lois physiques qui contrôlent le mouvement, la perte et la recharge des eaux dans le système, et insistent donc sur la nécessité d'une description correcte des différents processus en jeu et de leurs interactions.

Freeze et Harlan affirment qu'un modèle physique du comportement du bassin versant doit prendre en compte les relations physiques entre les phénomènes météorologiques et

l'évapotranspiration, la continuité entre les écoulements saturés et non saturés dans les sols, la continuité des écoulements souterrains dans des aquifères confinés et non-confinés co-existants, les écoulements de surface dans des géométries irrégulières en régime non-stationnaire et le rôle de la végétation dans les processus hydrologiques.

Les premières contributions de développement de modèles hydrologiques distribués ont été menées à la fin des années 60 (e.g. ; Woolhiser et Liggett, 1967; Foster et al., 1968; Pinder et Bredehoeft, 1968 ; Freeze, 1969). Certaines d'entre elles se sont intéressées à modéliser le processus d'infiltration et le coupler au processus de ruissellement de surface pour décrire les interactions entre la surface topographique et le milieu souterrain, ce qui a contribué à la genèse des modèles hydrologiques dits intégrés (e.g. ; Hanks et al, 1969; Rubin, 1969; Smith and Woolhiser, 1971; Freeze, 1972a; Freeze, 1972b).

1.2.2. Avancées de la modélisation hydrologique intégrée

1.2.2.1. Avancées dans la compréhension des processus de genèse de ruissellement

Parallèlement aux travaux de développement de la modélisation hydrologique, d'autres projets de recherche ont apporté des conceptions plus avancées sur la genèse des débits dans les cours d'eau dans les bassins versants que celle proposée par Horton (1933). La théorie de Horton (1933) veut que le ruissellement de surface naisse lorsque l'intensité des précipitations dépasse la capacité d'infiltration du sol. Cette forme de ruissellement est connue pour se produire sur des pentes de collines non végétalisées qui ont de faibles capacités d'infiltration et peu de développement du sol (Dunne et al., 1975).

La plupart des études récentes sur le ruissellement dans les bassins tempérés a souligné que l'écoulement de surface de Horton ne se produit pas et que l'écoulement souterrain est la source principale des eaux de ruissellement (Whipkey, 1965, 1969; Hewlett & Hibbert, 1967; Weyman, 1970; Pilgrim et al., 1978; Mosley, 1979). Dunne & Black (1970a, 1970b) et Freeze (1974) ont souligné l'importance des zones de sources à surface variable qui génèrent un écoulement de surface par saturation et alimentent principalement les eaux de ruissellement.

Une nappe superficielle peut monter et intercepter la surface du sol pour produire des phénomènes d'exfiltration et générer des surfaces saturées, sous l'influence d'un apport d'eau à la frange capillaire qui la surmonte. Sklash et Farvolden (1979) et Abdul and Gillham (1984)

ont étudié ce phénomène, en particulier d'intumescence de la nappe qui augmente localement les gradients de potentiel hydraulique et alimente le cours d'eau. Le cas des écoulements préférentiels dans les macropores était également encore mal connu sur le plan théorique pour pouvoir être implémenté dans des modèles physiques et fut l'objet d'étude par certains chercheurs (e.g. ; Beven and Germann, 1982 ; Germann, 1990; McDonnell, 1990; Germann et DiPietro, 1996). Ces cheminements préférentiels (ruissellement diffus, macropores du sol, circulations karstiques, zones de fissuration) sont particulièrement importants à prendre en considération dans l'étude des aléas hydrologiques que constituent les crues et sécheresses exceptionnelles.

D'autres chercheurs ont revisité la théorie de Horton et tous ces travaux ont participé à l'avancée des connaissances fondamentales sur les processus souterrains et leurs interactions avec la surface permettant ainsi de mieux représenter l'ensemble des mécanismes de genèse du ruissellement dans les modèles distribués à base physique de bassins versants.

1.2.2.2. Evolution des outils numériques

Des progrès dans de nombreux domaines contribuent à l'amélioration et au développement continu de la modélisation hydrologique de bassins versants. On peut notamment mentionner l'évolution des méthodes de discrétisation spatiales (e.g., Neuman et Witherspoon, 1970; Raviart et Thomas, 1977 ; Ackerer et al, 1990), des techniques de traitement des phénomènes d'hystérésis et de la non-linéarité (e.g., Putti et Paniconi, 1994), des stratégies d'optimisation du choix du pas de temps de résolution (e.g., Tocci et al, 1997 ; Williams and Miller, 1999) et des techniques de calibration et d'estimation de paramètres (e.g., Kitadinis et al, 1985 ; Kool et al 1987). Par exemple, l'équation générale de l'écoulement non saturé (Equation de Richards) est hautement non-linéaire ce qui la rend difficile à résoudre. Elle peut être formulée de trois manières différentes selon les variables d'état que l'on fait intervenir (e.g., Celia et al, 1990, Ross, 1990). Des études comparatives se sont intéressées à l'influence du choix de l'une ou l'autre des formulations sur la précision des résultats. La formulation de l'écoulement en terme du potentiel hydrique du sol pose souvent des problèmes de conservation du bilan de masse alors que sa formulation mixte (potentiel et teneur en eau) garantit un bilan équilibré (Celia et al., 1990). En l'absence d'une solution analytique fiable, quelques travaux

présentés par différents auteurs ont proposé des schémas numériques capables d'approcher la solution de l'équation de Richards et de gérer son caractère non linéaire (e.g., Putti and Paniconi, 1994).

Le développement récent et rapide des Systèmes d'Informations Géographique a également facilité l'accès à la connaissance géographique et physique du bassin versant et a permis de gérer et d'exploiter des données détaillées relatives au bassin versant.

Malgré l'évolution des outils numériques, d'autres problèmes méthodologiques sont toujours d'actualité, notamment ceux liés à la caractérisation des forçages et de l'hétérogénéité spatiale des milieux naturels. L'impact de l'hétérogénéité des propriétés a été largement étudié et une multitude d'études de terrain et de modélisation ont aidé à établir des liens entre l'hétérogénéité de la conductivité hydraulique et les différentes propriétés du milieu (e.g., Freeze, 1980 ; Loague, 1988 ; Singh, 1997). Des efforts sont encore nécessaires pour mieux tenir compte des hétérogénéités et des corrélations entre variables et les intégrer dans les modèles en développant des approches de caractérisation in situ et d'interpolation (e.g., Haverkamp and Vauclin, 1979, Romano et al., 1998; Szymkiewicz and Helmig, 2011).

1.2.2.3. Développement des premiers modèles intégrés

Les eaux de surface et souterraines ont été étudiées classiquement comme deux entités séparées (Kalbus et al 2006). L'histoire des modèles hydrologiques intégrés à base physique remonte à plus de 50 ans, lorsque Freeze et Harlan ont publié leur "Blueprint" en 1969. Cette publication pionnière en hydrologie était probablement la première tentative de mise au point du concept d'un modèle futuriste de surface et de sub-surface entièrement intégré et à base physique (Maxwell et al. 2014). Néanmoins, les limites à l'époque en ressources de calcul, en techniques numériques et le manque de compréhension complète des interactions surface-subsurface ont retardé l'apparition de ce type de modélisation jusqu'à la fin des années 90, pour ensuite voir se développer le modèle InHM (Integrated Hydrology Model) par VanderKwaak et Loague (2001). Et puis, d'autres modèles hydrologiques intégrés se sont développés dont on cite Hydrogeosphere (Therrien et al, 2005), MODHMS (Panday et Huyakorn, 2004), tRibs (Ivanov et al, 2004), Parflow (Kollet et Maxwell, 2006), PIHM (Qu et Duffy, 2007),

CATchment HYdrology (CATHY - Camporese et al, 2010), et PAWS (Shen et Phanikumar, 2010).

Les couplages et les interactions entre processus sont complexes et pas toujours simples à formaliser, en particulier aux interfaces. Les premiers modèles hydrologiques intégrés étaient conçus pour simuler quantitativement les processus d'écoulement d'eau, aborder l'intégralité des processus de transferts du cycle de l'eau comme un seul continuum, notamment à l'interface surface-subsurface et coupler les processus entre les deux compartiments (VanderKwaak et Loague, 2001 ; Panday et Huyakorn, 2004; Ebel et Loague, 2006; Kollet et Maxwell, 2006; Li et al., 2008; Mirus et al., 2007, 2009; Goderniaux et al., 2009; ; Weill et al., 2009).

L'innovation des modèles intégrés est de reproduire les processus de transferts d'eau dans les différents compartiments des bassins versants représentés par des équations aux dérivées partielles en couplant l'ensemble des processus et en capturant leurs interactions. Désormais, il est possible de résoudre les équations de flux de la surface et du souterrain dans une seule modélisation entièrement couplée, même à haute résolution spatiale (Maxwell et al., 2015).

1.2.2.4. Les différentes stratégies de couplage entre les écoulements de surface et souterrain

CATchment HYdrology (CATHY - Camporese et al, 2010), HydroGeoSphere (Therrien et al., 2005) et ParFlow (Kollet et Maxwell, 2006) sont aujourd'hui les modèles hydrologiques intégrés les plus utilisés et sont dotés d'une capacité prédictive avancée des interactions complexes entre les eaux souterraines et les eaux de surface, basés sur les équations de Saint-Venant – ou ses approximations de l'onde diffusive ou de l'onde cinématique – pour la description des écoulements de surface et l'équation de Richards pour l'écoulement souterrain.

Plusieurs options de couplage entre les écoulements de surface et souterrain sont disponibles. Maxwell et al. (2014) ont réalisé une étude de comparaison des modèles hydrologiques intégrés fondés sur trois techniques de couplage différentes : échange du premier ordre, switch des conditions aux limites, et continuité de la pression. La première stratégie de

couplage représente les interactions nappe-rivière par un terme d'échange défini comme le produit de la différence de potentiel entre le sol et la surface et d'un coefficient d'échange, qui dépend de la perméabilité, de la densité de viscosité de l'eau et de l'épaisseur de l'interface d'échange (VanderKwaak et Loague, 2001; Panday et Huyakorn, 2004). Cette approche conceptuelle est la plus simple à introduire dans les modèles, bien que, dans la pratique, il soit compliqué d'estimer le coefficient d'échange à partir des mesures de terrain (Kollet et Zlotnik, 2003). La procédure de switch des conditions aux limites (Camporese et al., 2010) décrit un couplage surface-subsurface qui vérifie la condition de continuité des flux et des pressions à l'interface. Cette approche n'est pas coûteuse et conserve le bilan de masse. En revanche, elle reste difficile à implémenter parce qu'elle exige une bonne description de la physique locale des processus et un traitement individuel de tous les scénarios. La troisième méthode de couplage est plus générale et s'appuie sur une continuité imposée des pressions et des flux (Kollet et Maxwell, 2006). Cette technique est également complexe à mettre en place, mais ne nécessite pas de déterminer le flux d'échange. Elle exige donc moins de variables d'entrée et permet d'éviter les difficultés d'estimation de certains paramètres liés à la couche d'échange.

1.2.2.5. Champs d'application classiques et émergents des modèles hydrologiques intégrés

La modélisation intégrée a pour objectif de traiter les problématiques liées aux ressources en eau d'un point de vue quantitatif en couplant les différentes disciplines qui les caractérisent. Les premières applications de modèles hydrologiques intégrés sur des bassins versants ont prouvé leur capacité à décrire les réponses des systèmes réels et à mieux expliquer des processus difficilement quantifiables par les méthodes expérimentales (e.g. Loague et al, 2005; Werner et al, 2006 ; Kollet et Maxwell, 2008 ; Li et al, 2008 ; Jones et al, 2008).

La description des processus d'écoulement d'eau dans les bassins versants est l'un des champs d'application classiques des modèles hydrologiques intégrés. Par exemple, Kollet et Maxwell (2008) analysent l'influence de la dynamique des eaux souterraines sur le bilan énergétique à la surface topographique à l'aide d'une approche de modélisation intégrée et distribuée des bassins versants introduite dans le modèle Parflow. Kollet et Maxwell (2008) ont appliqué ce modèle sur le bassin versant du Little Washita, aux États-Unis, sur une période d'un an pour étudier l'interaction entre les eaux souterraines, l'évapotranspiration et l'atmosphère à

partir d'une approche conceptuelle et mettre en évidence l'impact de la nappe sur les flux d'évapotranspiration à l'aide d'une variété de mesures statistiques conventionnelles et spatiales. Le même modèle intégré Parflow a été appliqué pour un ensemble de simulations basées sur des données synthétiques et des données issues du bassin versant Usadievskiy en Russie, et a permis de mieux comprendre les processus de genèse de ruissellement en comparaison avec d'autres modèles manquant de contraintes (Maxwell and Miller, 2005). Le modèle CATHY a été largement utilisé dans le diagnostic de bassins versants et dans la gestion des ressources en eau. Weill et al (2013) l'appliquent sur un petit bassin versant situé la région des collines de Bregonze au nord d'Italie et instrumenté pour la surveillance hydrologique et démontrent l'impact important exercé par la topographie de surface sur l'évolution spatio-temporelle des zones saturées. Camporese et al (2014) l'appliquent sur le bassin versant de Larch Creek situé dans les Alpes Italiennes pour reproduire les divers processus non linéaires, en particulier les effets de seuil et les boucles d'hystérésis dans la relation débit-stockage d'eau du bassin versant et étudier l'influence de l'hétérogénéité et de la topographie de l'aquifère sur cette dynamique non linéaire. Cette étude montre qu'un modèle hydrologique intégré basé sur l'équation de Richards est capable de reproduire les comportement complexes (forte non-linéarité, hystérésis et seuillage) observés dans le bassin versant sans devoir représenter l'hystérésis d'une manière explicite. Camporese et al (2019) étudient ensuite la capacité des modèles hydrologiques intégrés basés sur la résolution de l'équation de Richards à reproduire correctement la réponse des systèmes hydrologiques aux forçages naturels et anthropiques. Le modèle CATHY a été appliqué à un versant expérimental situé dans le Parc d'État de la montagne de Panola aux États-Unis et a été en mesure de bien capturer les effets de la géométrie du substratum rocheux sur le comportement du versant lié aux processus de remplissage et de vidange dans le compartiment souterrain, à condition que cette géométrie soit représentée avec précision lors de la paramétrisation du modèle.

Les modèles hydrologiques intégrés sont de plus en plus utilisés pour réaliser des études interdisciplinaires en hydrologie (Ebel et al., 2009). Ils sont en constante évolution pour réussir à aborder des problématiques plus complexes telles que la modélisation des processus d'érosion (e.g., Heppner et al., 2007), la séparation d'hydrogramme (e.g., Kirchner, 2003 ; Jones et al, 2006; Botter et al, 2010; Weill et al., 2013; Liggett et al, 2014), la simulation hydrologique à très grande échelle (e.g., Li et al., 2008 ; Goderniaux et al., 2009 ; Sulis et al., 2011; Maxwell

et al., 2015) ou l'influence des activités anthropiques sur le cycle hydrologique et la représentation des ouvrages (e.g., Hwang et al, august 2019a). De nos jours, les modèles hydrologiques intégrés ne cessent d'élargir leurs champs d'applications en incluant plus de mécanismes comme les interactions avec la basse atmosphère, les processus écohydrologiques et les processus de transport (e.g., Maxwell et al , 2007; Kollet and Maxwell, 2008; Maxwell et al, 2011; Weill et al, 2011 ; Shrestha et al., 2014; Niu et Phanikumar, 2015; Bao et al, 2017; Li et al, 2017 ; Davison et al, 2018; Forrester et al, 2018 ; Hwang et al, june 2019b ; Azarnivand et al, 2020b; Maina et al, 2020c).

1.3. La modélisation hydrologique intégrée des processus de transport des solutés

Comme mentionné précédemment, la modélisation hydrologique intégrée constitue un outil de diagnostic de l'état de la ressource en eau et de prédiction de son évolution et de l'influence des actions de gestion et des perturbations naturelles et anthropiques supportées par la ressource.

Suite à une contamination, les solutés polluants peuvent atteindre les eaux souterraines à partir des eaux de surface via la recharge de la nappe. Inversement, les contaminants risquent d'être transportés des eaux souterraines vers les eaux de surface sous l'effet d'un drainage souterrain, en particulier pendant une période d'étiage au cours de laquelle les eaux de surface sont principalement alimentées par les nappes souterraines. Le même constat s'appliquerait également en périodes de très hautes eaux produisant de l'exfiltration de nappe transformée en ruissèlement diffus, ensuite « routé » par le réseau drainant de surface. Ces interactions dépendent donc de plusieurs facteurs naturels tels que la topographie et le climat mais également des pratiques humaines à savoir les activités agricoles, la mise en place des systèmes de pompage, etc.

Avec le renforcement de la régulation environnementale, les prévisions par modèles numériques de la qualité de l'eau sont de plus en plus demandées afin d'obtenir des informations quantitatives sur l'état de la ressource en eau et aider les décideurs à évaluer différentes options de gestion.

Aujourd'hui, malgré le progrès de la modélisation intégrée dans l'étude des processus de transferts d'eau, peu de modèles intégrés disposent d'outils de simulation des processus de

transport. Ces outils seraient notamment utiles pour décrire le transfert d'éléments dissous dans l'eau, l'évolution spatio-temporelle des signatures biogéochimiques dans les bassins versants et les processus de transport solide en surface (Heppner et al, 2006 ; Heppner et al, 2007 ; Ran et al, 2007 ; Li and Duffy, 2011). Quelques travaux se sont orientés également vers le couplage des modèles intégrés avec des modèles biogéochimiques pour mieux représenter les processus hydrologiques de transport et les processus de transformations physico-chimiques de certains éléments (azote, carbone, phosphore, pesticides, ...) et décrire les grands cycles biogéochimiques (e.g., Li et al, 2017; Bao et al, 2017; Shi et al, 2018; Li et al 2019 ; Zhi et al, 2019). Une équipe de recherche de Penstate University a beaucoup travaillé sur le couplage du modèle intégré PIHM avec des modèles biogéochimiques pour mieux comprendre l'évolution spatio-temporelle des signatures biogéochimiques dans les bassins versants. Bao et al (2017) développent le modèle hydrogéochimique intégré RT-Flux-PIHM pour comprendre les interactions complexes entre les processus hydrologiques (PIHM), les processus de surface terrestre (FLUX—Noah Land Surface Model) et le transport réactif souterrain (RT). Ce modèle est testé sur des données de l'observatoire de la zone critique de Susquehanna Shale Hills (SSHCZO) dans l'idée d'analyser les principaux processus qui régissent la dynamique hydrogéochimique du chlorure non réactif et du magnésium réactif. Les résultats de simulations indiquent que les caractéristiques des bassins versants, en particulier la topographie, contrôlent les distributions spatiales des flux d'eau et des taux de dissolution des roches, et donnent ainsi exemple de la capacité du modèle à coupler les processus hydrologiques et les signatures géochimiques. En complément de cette étude, Li et al (2017) appliquent ce même modèle pour capturer les liens entre le débit et la signature géochimique de la rivière du bassin versant et expliquer son comportement chémostatique. Zhi et al (2019) développent ensuite le modèle BioRT-Flux-PIHM en introduisant les processus biotiques dans le modèle précédent. Ils l'appliquent aux données d'un bassin versant montagneux (Coal Creek), situé dans le Colorado aux Etats-Unis, pour étudier les relations concentration-débit et prédire l'altération chimique et le cycle biogéochimique dans des conditions climatiques et anthropiques variables.

S'agissant des mécanismes de transport des éléments, la mise en place d'une stratégie de couplage surface-subsurface pour les solutés peut s'avérer très compliquée et requiert la définition des flux d'échange diffusifs et advectifs en cohérence avec la technique de couplage adoptée pour l'écoulement de l'eau afin d'assurer la conservation de la masse, sans oublier

l'importance du choix des paramètres qui influence fortement les résultats de simulation (e.g., Jones et al, 2006 ; Liggett et al, 2013).

1.3.1. Les différentes méthodes de résolution numériques du système couplé

Les modèles Hydrogeosphere (Therrien et al, 2003) et CATHY (Weill et al, 2011) sont à notre connaissance les deux seuls modèles intégrés capables de reproduire les processus de transport dans le continuum surface-subsurface en implémentant un module de résolution de l'équation d'advection-dispersion (EAD) et le combinant avec la partie d'écoulement. Une telle approche exige de faire face à de nombreux défis d'un point de vue physique et numérique. La résolution des deux systèmes d'équations écoulement diffusif et advection-dispersion dans une même structure de modèle est complexe et nécessite un effort de calcul important en raison de leurs natures différentes.

Il existe deux techniques principales pour résoudre les équations d'écoulement et de transport couplées : (i) les approches de séparation d'opérateurs, qui résolvent les équations d'une manière séquentielle, et (ii) les approches pseudo-analytiques, utilisées sur un schéma implicite et qui résolvent les systèmes d'équations simultanément (Jacques et al., 2006).

Les approches de séparation d'opérateurs sont souvent utilisées pour résoudre des systèmes d'équations complexes en séparant les équations gouvernantes en sous-ensembles d'équations, chacun capturant une partie de la physique présente dans le système (Ren et al., 2014). Parmi les techniques de séparation d'opérateurs, on cite l'approche séquentielle non itérative qui consiste à résoudre séquentiellement la partie d'écoulement puis la partie du transport sans itération. Les approches de séparation d'opérateurs fournissent des méthodes numériques efficaces et adaptées pour résoudre séparément les deux systèmes d'équations d'écoulement et d'advection-dispersion dans le même modèle (Lagneau et Van der Lee, 2010). Néanmoins, ces approches exigent le recours à différentes méthodes numériques et peuvent s'avérer très coûteuse. A titre d'illustration, dans le modèle CATHY, l'équation de Richards 3D est discrétisée dans l'espace par la méthode des éléments finis « Galerkin » et l'équation d'onde diffusive par la méthode de Muskingum-Cunge explicite (Orlandini and Rosso, 1996). Pour sa part, l'équation d'advection-dispersion est résolue en deux phases distinctes : la partie advective est calculée à partir de la méthode des volumes finis qui assure une conservation de la masse et la partie dispersive est résolue par éléments finis. Une telle séparation d'opérateur nécessite un

passage à chaque pas de temps des concentrations aux nœuds des éléments finis à celles des centres des volumes finis et inversement, ceci pouvant engendrer de la diffusion numérique.

En ce qui concerne les approches pseudo-analytiques, elles présentent l'avantage d'une résolution simultanée de tous les processus, en assurant la conservation de la masse. Ces approches sont moins sensibles aux grands pas de temps et permettent par conséquent d'aborder les problématiques liées au transport des pesticides à l'échelle du bassin versant. Cependant, ces méthodes sont généralement très complexes d'un point de vue mathématique et nécessitent une grande taille mémoire du calculateur (Jacques et al., 2006).

1.3.2. Intégration du transfert de solutés et champs d'application

Le recours aux modèles hydrologiques intégrés pour répondre aux problèmes de qualité des ressources en eau n'est pas encore très commun. Jusqu'à présent, peu de chercheurs étudient l'évolution de la qualité de l'eau au moyen d'une approche de modélisation intégrée pour améliorer la prise de décision. Niu et Phanikumar (2015) proposent un modèle du transport des solutés à l'échelle du bassin versant basé sur le modèle hydrologique intégré PAWS, à partir d'une approche de séparation d'opérateurs qui distingue une méthode Lagrangienne du transport des particules pour l'advection et une approche eulérienne pour la dispersion et les réactions. Les processus hydrologiques et les mécanismes de transport sont étroitement couplés et leurs interactions entre les différentes composantes hydrologiques sont explicitement modélisées. Le modèle de transport a d'abord été testé à l'aide des solutions analytiques disponibles et des données expérimentales à l'échelle de la parcelle pour différents domaines hydrologiques. Il a ensuite été appliqué au bassin versant de la rivière Red Cedar aux Etats-Unis pour étudier l'impact des rejets de station d'épuration sur la qualité de l'eau et simuler le devenir et le transport des bactéries (plus spécifiquement les *Escherichia coli* – E.coli). Une comparaison entre les concentrations d'E. coli simulées et observées montre que le modèle reproduit correctement l'évolution des concentrations et s'avère utilisable pour des prédictions en temps quasi réel sur les plages marines et d'eau douce. Pourtant, des incertitudes peuvent être associées au manque de données pour de nombreuses sources éventuelles. Le module d'écoulement dans PAWS néglige la diffusion latérale de l'humidité du sol (écoulement 1-D vertical en zone

vadose), ce qui risque également d'engendrer des erreurs dans les situations où le transport latéral de contaminants dans la zone non saturée est important.

Le modèle intégré Hydrogeosphere a été utilisé avec succès pour simuler les transferts combinés d'eau, de chaleur et de soluté à l'échelle des bassins versants (e.g., Jones et al., 2008 ; Brookfield et al., 2009 ; Frei and Fleckenstein, 2014 ; Ala-aho et al., 2015 ; Liggett et al., 2015). Jones et al (2006) et Liggett et al (2014) s'intéressent à la thématique de séparation d'hydrogrammes pour déterminer les contributions des eaux souterraines dite « anciennes » pendant un événement pluvieux par des expériences de traçage. Jones et al (2006) utilisent le modèle Hydrogeosphere avec pour objectif d'analyser de façon couplée la dynamique du système d'écoulement lors d'un événement orageux, conjointement avec le transport advectif et/ou dispersif des traceurs conservatifs. Les auteurs étudient également l'impact des processus de mélange hydrodynamique et de dispersion physique sur les variations des concentrations de traceurs et donc sur les estimations des contributions respectives des eaux nouvelles et anciennes. Liggett et al (2014) utilisent le même modèle intégré pour comparer les effets de la dispersion hydrodynamique, à la fois dans le compartiment souterrain et à l'interface surface-subsurface, sur la contribution des eaux nouvelles et anciennes à l'écoulement fluvial, à partir d'une séparation d'hydrogramme basée sur des traceurs. Ce travail montre que les modèles numériques de transfert de solutés à l'échelle du bassin versant sont très sensibles à la représentation de l'interface surface-subsurface et aux échanges dispersifs et exigent par conséquent un traitement minutieux pour interpréter correctement les expériences de traçage.

Récemment, le modèle intégré Hydrogeosphere a été utilisé pour diverses applications de gestion de l'eau, notamment pour étudier l'impact : 1- des réseaux de drainage souterrain (e.g., Frey et al., 2016, De Schepper et al., 2017), 2- des activités d'exploitation d'un barrage (e.g., Valerio et al., 2010, Brookfield et Gnau, 2016), et 3- des réseaux de distribution d'eau (e.g., Hwang et al., 2019a, Hwang et al., 2019b). Dans l'ensemble, ces études ciblent le soutien à la prise de décision en matière de gestion qualitative de la ressource en eau à l'aide de modèles intégrés surface-subsurface. Le drainage souterrain est une technique de gestion bénéfique qui permet de réduire les charges en éléments nutritifs dans les eaux de surface. Frey et al., 2016 montrent que le modèle HydroGeoSphere à double perméabilité est un outil de gestion du drainage souterrain, efficace pour identifier les processus qui impactent ses effets sur le débit

dans des conduites sous drainage contrôlé ou libre. Ils analysent également avec succès le transport des éléments nutritifs, pendant une période de 36 jours, après une application d'engrais liquide sur un sol de loam argileux macroporeux. Cette étude représente explicitement les écoulements préférentiels et capture la forte contribution des macropores au débit dans les réseaux et leur influence sur le comportement des solutés. Ce travail met en évidence l'impact des drainages contrôlé et libre sur les interactions entre les eaux de surface et souterraines et sur les concentrations de solutés dérivés des pratiques en surface dans les effluents urbains.

1.4. La modélisation hydrologique intégrée dite « à dimension réduite »

La modélisation hydrologique intégrée s'est beaucoup développée au cours de ces dernières années. Par conséquent, plusieurs modèles hydrologiques intégrés sont aujourd'hui performants et capables de décrire certains phénomènes qui étaient difficiles à quantifier par les méthodes classiques. Cependant, il reste encore de nombreux défis à relever, notamment les problèmes méthodologiques liés, entre autres, au temps de calcul, à la paramétrisation et à la résolution numérique.

Des premières approches alternatives ont été proposées pour réduire l'effort de calcul requis pour résoudre de l'équation de Richards 3-D. La notion de modélisation dite à dimension réduite consiste à réduire la dimensionnalité du problème afin de diminuer le nombre de paramètres et le coût de calcul. De fait, la réduction de dimensionnalité existe de longue date puisqu'elle est présente dans les équations proposées par les précurseurs Dupuit et Forcheimer ou encore Boussinesq (e.g., Boussinesq, 1877 ; Brutsaert, 1994). Ces premiers travaux ne prennent pas en compte les formes tridimensionnelles des systèmes naturels ainsi que l'ensemble des processus hydrologiques, en particulier dans la zone non saturée, ce qui les rend peu efficaces pour des applications réelles (e.g. Sloan, 2000 ; Troch et al., 2003).

Depuis, plusieurs modèles hydrologiques à dimension réduite ont été développés dans l'optique d'établir le meilleur compromis entre simplicité, physique majoritairement préservée et efficacité. Duffy (1996) conçoit un modèle dynamique en seulement deux variables d'état, fondé sur l'intégration directe de l'équation de conservation locale par rapport aux volumes partiels occupés par la quantité d'eau retenue dans la zone non saturée et saturée. Sloan (2000) prouve que les fonctions stockage-débit à valeur unique décrivant l'écoulement souterrain sont

souvent incapables de représenter la dynamique réelle d'un bassin hydrographique. Il propose donc une fonction alternative dérivée d'une résolution de l'équation d'écoulement saturé à une dimension. Il démontre que le problème bidimensionnel d'écoulement souterrain puisse être réduit à un modèle conceptuel représenté par l'équation d'écoulement unidimensionnel et valide son applicabilité sur un bassin fluvial réel. Troch et al. (2003) développent une approche plus avancée à partir d'une reformulation de l'équation de Hillslope-Storage Boussinesq (HSB). L'équation HSB décrit, sur la base de la théorie de Dupuit, la réponse d'un bassin versant à partir d'une représentation explicite de sa géométrie réelle par une seule équation monodimensionnelle. Le comportement du modèle a été étudié pour différents types de pentes (uniformes, convergentes et divergentes) avec des caractéristiques du sol identiques et uniformes. Hilbert et al. (2007) améliorent l'approche HSB en la couplant à une équation de Richards 1-D, dans le but de mieux décrire les flux d'eau verticaux dans la zone non saturée. Hazenberg et al. (2015) proposent une approche qui couple l'équation de Richards monodimensionnelle verticale pour l'écoulement en zone non saturée avec l'équation HSB pour la zone saturée et les équations d'onde diffusive pour l'écoulement de surface, au lieu de résoudre l'équation de Richards 3-D complète. L'idée reste d'incorporer les processus hydrologiques à l'échelle des versants dans des modèles numériques de la surface terrestre (Land Surface Models – LSMs) destinés aux modèles du système terrestre (Earth System Models – ESMs). Hazenberg et al. (2016) testent le modèle réduit développé h3D à l'aide d'observations issues de deux versants différents (LEO et miniLEO) situés aux environs de Tucson - Arizona aux États-Unis et confirment sa capacité de simuler correctement le comportement hydrologique des versants. Kong et al. (2016) améliorent davantage le modèle HSB en tenant compte à la fois des flux verticaux et latéraux en milieu non saturé. Broda et al. (2012) proposent un autre modèle réduit capable de simuler un écoulement combiné d'eaux souterraines peu profondes et profondes pour prendre en considération l'interaction entre les aquifères de surface et les aquifères profonds. Ce modèle se base sur l'équation HSB pour représenter l'écoulement des eaux souterraines peu profondes et un modèle d'élément analytique (AE) pour décrire l'écoulement des eaux souterraines profondes.

Les travaux récents de Pan et al. (2015) et Jeannot et al. (2018) ont permis de développer le modèle hydrologique intégré à dimension réduite NIHM (Normally Integrated Hydrological Model) qui propose une nouvelle approche de réduction de dimensionnalité. Le modèle repose

sur l'intégration des écoulements souterrains 3-D selon une direction perpendiculaire au substratum en un formalisme 2-D, sous l'hypothèse d'un équilibre hydrostatique instantané le long de la direction normale. Cette approche permet de réduire le nombre de paramètres à renseigner et de diminuer le coût de calcul par rapport aux modèles tridimensionnels. NIHM couple un modèle d'écoulement souterrain réduit en 2-D à un flux de ruissellement en chenaux 1-D et un flux de ruissellement de surface 2-D (Pan et al., 2015 ; Weill et al., 2017 ; Jeannot et al., 2018, 2019). Le modèle NIHM a été appliqué avec succès à l'analyse des écoulements de surface et de nappes peu profondes sur le bassin versant du Strengbach et sur l'île du Rohrshollen (Jeannot et al., 2019, Weill et al., 2019).

Ainsi que mentionné précédemment, peu de modèles intégrés introduisent les processus de transport dans leurs fonctionnalités. De surcroît, ces modèles simulant le transport sont généralement très complexes, coûteux et posent de nombreux problèmes. A ce jour, les travaux qui proposent des modèles à dimension réduite incluant les processus de transport des solutés sont encore assez rares. Les modèles réduits, cités dans la littérature et traitant du transfert de polluants, sont généralement basés sur la méthode de décomposition orthogonale aux valeurs propres (POD : proper orthogonal decomposition). Cette approche a été introduite par Sirovich en 1987. Néanmoins, certaines non-linéarités associées à de nombreux systèmes d'eaux souterraines peuvent affecter l'exactitude de ce type de modèle. Les modèles intégrés à dimension réduite ont très peu évolué vers une description des processus du transfert de solutés, et ce constat sert de point de départ à ce travail de thèse.

1.5. Objectifs du projet de thèse

En réponse au besoin émergent de développer des modèles intégrés de transfert de solutés moins coûteux et performants, l'objectif général de cette thèse est d'incorporer des processus de transport dans le modèle hydrologique intégré NIHM en tenant compte des interactions à l'interface surface-subsurface. L'implémentation numérique de la simulation du transport, s'inspire d'un modèle éprouvé et avancé sur ses techniques numériques, à savoir : TRACES (Transport RéActif de Contaminants dans les Eaux Souterraines) (Hoteit et Ackerer, 2004). L'évaluation de l'intégration d'un module transport dans NIHM sera conduite par comparaison sur divers scénarios eux-mêmes calculés pour l'écoulement et le transport en 3-D

avec TRACES dans sa version appropriée (résolution d'une équation de Richards 3-D pour l'écoulement dans les zones saturée et non saturée de la sub-surface et une équation d'advection-dispersion 3-D pour le transport de solutés). La résolution du transport dans NIHM associé au ruissèlement diffus 2-D de surface et au routage 1-D du réseau de drainage, n'est pas véritablement abordé, attendu que NIHM ne souffre pas vraiment de perte de dimensionnalité comparé à des modèles plus complexes.

L'approche sera menée dans un premier temps sur des cas tests synthétiques ne comportant que le milieu souterrain pour bien évaluer l'impact de l'intégration des écoulements souterrains 3-D en un formalisme 2-D sur les simulations du transport. En effet, l'intégration des paramètres du modèle à dimension réduite sous-estime la conduction latérale de la zone non saturée, qui joue un rôle important dans le transport de solutés. Toutefois, les faibles écarts entre les simulations d'écoulement réalisées avec le modèle NIHM et celles d'un modèle complet 3-D augurent d'une représentation moyenne correcte (mais non optimale en valeurs locales) des processus de transferts dans les domaines souterrains. Le but est donc de tester le module du transport en milieu souterrain du modèle NIHM dans des conditions de saturation et d'hétérogénéité variables, en réalisant des inter-comparaisons avec les résultats produits avec une approche complète 3-D. Une seconde phase, toujours sur des cas synthétiques, évaluera l'impact l'approche à dimension réduite couplée surface-subsurface sur la modélisation des processus du transport. Enfin, la dernière phase de la thèse consistera à décrire le transport de solutés en appliquant le modèle NIHM sur des données réelles issues de l'Île du Rohrschollen.

Chapitre 2 : Matériels et méthodes

Ce travail de thèse s'inscrit dans la problématique générale de développement d'un modèle hydrologique intégré à dimension réduite capable de décrire les processus de transport de solutés en intégrant les interactions entre surface et milieu souterrain. L'objectif de cette partie est de présenter les outils de modélisation et les stratégies utilisés pour le développement d'un tel modèle. Ce chapitre décrit le formalisme mathématique, les méthodes de résolution numériques et s'attarde sur les différentes étapes de construction du modèle de transport NIHM-T en détaillant d'abord le compartiment souterrain puis celui de surface. Enfin, les méthodes du couplage surface-subsurface pour le transfert de solutés sont abordées.

2.1. Outils de modélisation

2.1.1. Le modèle d'écoulement NIHM

Le modèle hydrologique NIHM (Normally Integrated Hydrological Model ; Pan et al., 2015 ; Weill et al., 2017 ; Jeannot et al., 2018, 2019) couple un modèle souterrain à dimension réduite 2-D à un écoulement de surface 2-D et à un écoulement en chenaux 1-D. Il s'est avéré efficace pour reproduire les réponses hydrologiques de divers systèmes complexes (Jeannot et al., 2018, 2019).

Ce travail de thèse s'intéresse à la description des processus d'écoulement et de transport de solutés dans les deux compartiments du modèle hydrologique NIHM : la partie souterraine à dimension réduite et la partie de ruissellement de surface 2-D, en prenant en compte les interactions entre ces compartiments. L'objectif principal est de développer un modèle de transport à dimension réduite couplé surface-subsurface, sachant que le compartiment des écoulements en chenaux 1-D dans NIHM ne sera pas exploité par la suite.

2.1.1.1. Modèle souterrain à dimension réduite

Les écoulements en milieu poreux variablement saturé sont décrits par l'équation de Richards (1931), qui combine l'équation de conservation de la masse (Equation (2.1)) et la loi de Darcy-Buckingham (Equation (2.2)) (Freeze, 1971 ; Narasimhan, 2004, 2006) :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + S_s \frac{\theta}{\phi} \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = f \quad (2.1)$$

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K} \cdot \nabla h \quad (2.2)$$

h [L] est la charge hydraulique, θ [-] la teneur en eau, S_s [L⁻¹] le coefficient d'emmagasinement spécifique, \mathbf{q} le vecteur vitesse (LT⁻¹), ϕ [-] la porosité, \mathbf{K} [LT⁻¹] le tenseur de conductivité hydraulique et f [T⁻¹] un terme puits-source.

L'équation de base du compartiment souterrain à dimension réduite de NIHM est dérivée de l'intégration de l'équation de Richards 3-D sous sa forme « mixte », sur la direction z perpendiculaire au substratum (Figure 2.1). Les limites d'intégration sont les coordonnées du niveau du substratum de la nappe et de la côte topographique dans la direction z normale au substratum:

$$\underbrace{\int_{z_b}^{z_s} \frac{\partial \theta}{\partial t} dz}_{a_1} + \underbrace{\int_{z_b}^{z_s} \left(S_s S_w(\theta) \frac{\partial h}{\partial t} \right) dz}_{a_2} + \underbrace{\int_{z_b}^{z_s} \nabla \cdot (-\mathbf{K}(\theta) \nabla h) dz}_{a_3} = \underbrace{\int_{z_b}^{z_s} q_w dz}_{a_4} \quad (2.3)$$

S_w [-] est la saturation en eau ($S_w = \frac{\theta}{\phi}$) et q_w [T⁻¹] un terme puits-source.

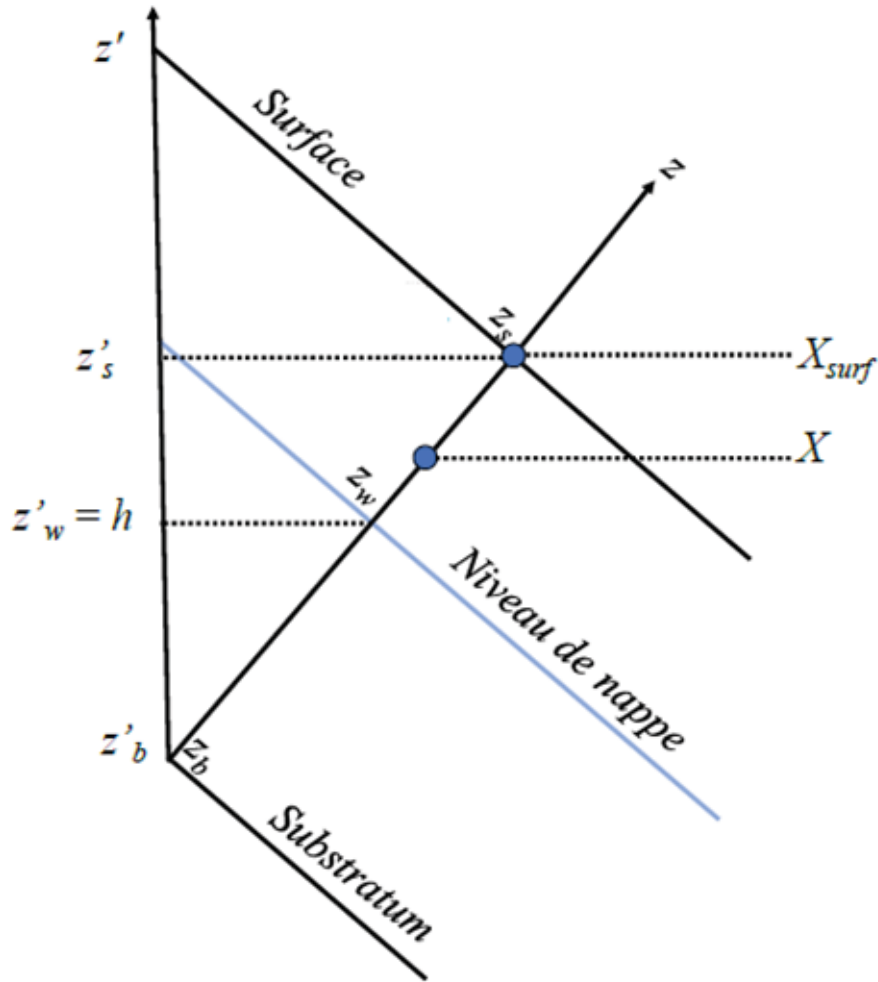


Figure 2.1 : Formalisme adopté pour la réduction de dimensionnalité dans le compartiment souterrain de NHIM. z_b , z_w , et z_s sont les coordonnées dans la direction z normale au substratum de la nappe, du niveau du substratum, du niveau de nappe, et de la côte topographique. z'_b , z'_w , et z'_s sont les coordonnées dans la direction z' verticale, du niveau du substratum, du niveau de nappe, et de la côte topographique (Jeannot et al., 2018).

Les fonctions décrivant les relations non linéaires entre la saturation effective, la teneur en eau et la conductivité hydraulique sont définies à partir du modèle de Van Genuchten (Van Genuchten, 1980).

Obtenir une réduction de dimensionnalité, via intégration selon z , suppose d'avoir une variable d'état h , la charge hydraulique, uniforme sur la direction z du substratum jusqu'à la surface du sol.

$$\frac{\partial h}{\partial z} = 0 \quad (2.4)$$

On calcule alors une seule valeur de charge hydraulique à chaque emplacement (x, y) , conduisant ainsi en une approche réduite en 2-D. Une charge hydraulique uniforme le long de la normale au substratum de la nappe, correspond à un équilibre hydrostatique local et suppose un écoulement de sub-surface parallèle au substratum.

En conséquence, la description de l'écoulement à travers la zone non saturée est simplifiée. Les précipitations efficaces – i.e. les précipitations moins l'évapotranspiration - sont considérées comme un flux de recharge faisant directement remonter le niveau de la nappe, mais faisant néanmoins également varier la teneur en eau du sol. Cette teneur en eau augmente donc en respectant l'hypothèse de l'équilibre hydrostatique instantané le long de z et les relations établies entre la pression (capillaire) et la saturation en eau. Les fronts d'infiltration et le stockage d'eau dans la zone non saturée ne sont pas décrits à la manière dont le ferait une approche tridimensionnelle basée sur l'équation de Richards.

On applique ensuite la règle de Leibnitz au terme a_1 dans l'équation (2.3). La règle de Leibnitz, ou comme on l'appelle parfois la règle de dérivation sous le signe d'intégration, permet de reformuler la dérivée d'une intégrale (ou l'intégrale d'une dérivée) dont les bornes sont fonction de la variable de différentiation :

$$\int_{a(x)}^{b(x)} \frac{\partial f(x, z)}{\partial x} dz = \frac{\partial}{\partial x} \int_{a(x)}^{b(x)} f(x, z) dz - f(x, b(x)) \frac{\partial b}{\partial x} + f(x, a(x)) \frac{\partial a}{\partial x} \quad (2.5)$$

Le terme a_1 s'écrit ainsi :

$$\int_{z_b}^{z_s} \frac{\partial \theta}{\partial t} dz = \frac{\partial}{\partial t} \int_z^{z_s} \theta dz - \theta(z_s, t) \frac{\partial z_s}{\partial t} + \theta(z_b, t) \frac{\partial z_b}{\partial t} \quad (2.6)$$

Puisqu'on suppose que l'altitude du substratum et de la côte topographique ne dépendent pas du temps :

$$\int_{z_b}^{z_s} \frac{\partial \theta}{\partial t} dz = \frac{\partial}{\partial t} \int_{z_b}^{z_s} \theta dz \quad (2.7)$$

En raison de l'hypothèse d'équilibre hydrostatique instantané le long de z , le terme a_2 peut s'écrire :

$$\int_{z_b}^{z_s} \left(S_s S_w (\theta) \frac{\partial h}{\partial t} \right) dz = \frac{\partial h}{\partial t} \int_{z_b}^{z_s} (S_s S_w (\theta)) dz \quad (2.8)$$

Puis, on fractionne les termes des équations (2.7) et (2.8) en introduisant la coordonnée du niveau de nappe dans la direction z qu'on note z_w [L] (Figure 2.1). On obtient :

$$\int_{z_b}^{z_s} \frac{\partial \theta}{\partial t} dz = \frac{\partial}{\partial t} \int_{z_b}^{z_w} \theta dz + \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_{z_w}^{z_s} \theta dz}_{b_1} \quad (2.9)$$

On notera que seul le terme b_1 d'accumulation persiste dans (2.9), puisque la variation de teneur en eau au cours du temps en zone saturée (entre z_b et z_w) est nulle.

$$\int_{z_b}^{z_s} \left(S_s S_w (\theta) \frac{\partial h}{\partial t} \right) dz = \frac{\partial h}{\partial t} \int_{z_b}^{z_w} (S_s S_w (\theta)) dz + \frac{\partial h}{\partial t} \int_{z_w}^{z_s} (S_s S_w (\theta)) dz \quad (2.10)$$

La partie située entre z_b et z_w correspond à la zone saturée qui se caractérise par une saturation en eau constante égale à 1. De plus, S_s est continu par morceaux en zone saturée. Il existe donc une valeur moyenne notée $S_{s_{sat}}$ tel que :

$$\int_{z_b}^{z_w} S_s dz = S_{s_{sat}} (z_w - z_b) \quad (2.11)$$

$S_{s_{sat}}$ est le coefficient d'emménagement spécifique dans la zone saturée moyenné par rapport à la profondeur. Ainsi :

$$\int_{z_b}^{z_s} \left(S_s S_w (\theta) \frac{\partial h}{\partial t} \right) dz = \frac{\partial h}{\partial t} S_{s_{sat}} (z_w - z_b) + \underbrace{\frac{\partial h}{\partial t} \int_{z_w}^{z_s} (S_s S_w (\theta)) dz}_{b_2} \quad (2.12)$$

La partie située entre z_w et z_s correspond à la zone non saturée. Par conséquent, le terme d'accumulation b_2 représentant le stockage en zone non saturée dû à la compressibilité du

milieu, est négligeable par rapport à la variation temporelle de la teneur en eau (terme b_1). En regroupant les termes de (2.9) et (2.12), on obtient :

$$\int_{z_b}^{z_s} \frac{\partial \theta}{\partial t} dz + \int_{z_b}^{z_s} \left(S_s S_w(\theta) \frac{\partial h}{\partial t} \right) dz = \frac{\partial}{\partial t} \int_{z_b}^{z_s} \theta dz + \frac{\partial h}{\partial t} S_{s_{sat}} h \quad (2.13)$$

A partir de l'équation (2.4), le terme a_3 se ramène à un problème 2-D dans les directions x et y formant une base orthonormée du plan normal à z , vu que $\partial h / \partial z = 0$:

$$\int_{z_b}^{z_s} \nabla \cdot (-\mathbf{K}(\theta) \nabla h) dz = \int_{z_b}^{z_s} \nabla_{xy} \cdot (-\mathbf{K}_{xy}(\theta) \nabla_{xy} h) dz \quad (2.14)$$

En appliquant la règle de Leibnitz (Equation (2.5)) pour l'opérateur gradient et pour l'opérateur divergence, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{z_b}^{z_s} \nabla_{xy} \cdot (-\mathbf{K}_{xy}(\theta) \nabla_{xy} h) dz = \\ \nabla_{xy} \cdot \int_{z_b}^{z_s} -\mathbf{K}_{xy}(\theta) \nabla_{xy} h dz - \nabla_{xy}(z_s) \cdot (-\mathbf{K}_{xy}(z_s) \nabla_{xy} h(z_s)) + \nabla_{xy}(z_b) \cdot (-\mathbf{K}_{xy}(z_b) \nabla_{xy} h(z_b)) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Attendu que l'équation (2.15) va ensuite être calculée à l'échelle locale d'un élément d'un modèle distribué, z est la normale locale au substratum de l'élément. A cette échelle, considérant que z_b et z_s varient peu à l'échelle de l'élément, leurs gradients sont négligeables. h ne dépendant pas de z , (2.15) peut s'écrire :

$$\int_{z_b}^{z_s} \nabla \cdot (-\mathbf{K}(\theta) \nabla h) dz = \nabla_{xy} \cdot \left(\underbrace{\int_{z_b}^{z_s} -\mathbf{K}_{xy}(\theta) dz}_c \cdot \nabla_{xy} h \right) \quad (2.16)$$

On fractionne ensuite le terme c en introduisant z_w . \mathbf{K}_{xy} est une fonction continue par morceaux en zone saturée (entre z_w et z_s) et ne dépend pas de la teneur en eau. Le terme c peut donc s'écrire :

$$\int_{z_b}^{z_s} -\mathbf{K}_{xy}(\theta) dz = \mathbf{K}_{sat}(z_w - z_b) + \int_{z_w}^{z_s} \mathbf{K}_{xy}(\theta(z)) dz \quad (2.17)$$

\mathbf{K}_{sat} est le tenseur de conductivité hydraulique saturée moyenné par rapport à la profondeur.

Finalement (2.3) se réécrit :

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \bar{S} \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (-\bar{\mathbf{T}} \nabla h) = Q_w \quad (2.18)$$

$$\text{avec : } \bar{\theta} = \int_{z_w}^{z_s} \theta(z) dz, \quad \bar{S} = S_{S_{sat}} h, \quad \bar{\mathbf{T}} = \mathbf{K}_{sat} h + \int_{z_w}^{z_s} \mathbf{K}_{xy}(\theta(z)) dz \quad \text{et} \quad Q_w = \int_{z_b}^{z_s} q_w dz.$$

Les termes $\bar{\theta}$ et $\bar{\mathbf{T}}$ sont définis mathématiquement par des intégrales. Ces intégrales, en cas d'hétérogénéité de milieu, sont simplement calculées à l'aide de la méthode d'intégration numérique des rectangles, en prenant soin d'avoir un pas d'intégration plus fin que la taille caractéristique « verticale » de l'hétérogénéité. Contrairement aux modèles 2-D plus simples (visant principalement à simuler le comportement de la zone saturée dans le cas d'un écoulement quasi horizontal, soit sous l'hypothèse de Dupuit), NIHM traite à la fois les zones saturées et non saturées de la subsurface dans un seul compartiment à dimension réduite.

Enfin, s'agissant de traiter des conditions limites standard d'un problème d'écoulement soit encore une condition de Dirichlet – charge imposée –, ou de Neumann – gradient de charge normal à la limite imposé – les intégrations simplifiées de Leibnitz s'appliquent et renvoient des termes 2-D compatibles avec la résolution de (2.18).

2.1.1.2. Le modèle de ruissellement de surface 2-D

Le ruissellement de surface est défini comme un sous-système d'écoulement à surface libre au-dessus du niveau topographique d'une lame d'eau d'épaisseur variable. Dans certaines circonstances, le ruissellement de surface peut constituer un processus important de la dynamique hydrologique des bassins versants. Le ruissellement de surface 2-D est généralement décrit par un modèle mathématique basé sur les équations de Saint-Venant, introduites par l'ingénieur français Adhémar Barré de Saint- à la fin du XIXe siècle (Strelkoff, 1969). Elles sont obtenues à partir d'une intégration des équations de Navier-Stokes sur toute l'épaisseur de la lame d'eau, sous l'hypothèse d'équilibre hydrostatique le long de cette épaisseur (e.g., Herouin, 1991 ; Zhang, 1992). Les vitesses sont donc substituées par leur

valeur moyenne sur la verticale. La version complète et non simplifiée des équations de Saint-Venant est connue sous le nom de modèle d'onde dynamique.

$$\frac{\partial h_s}{\partial t} + \frac{\partial(u_x h_s)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y h_s)}{\partial y} = \Upsilon_{2D} \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial(u_x h_s)}{\partial t} + \frac{\partial(u_x^2 h_s)}{\partial x} + \frac{\partial(u_x u_y h_s)}{\partial y} = -gh_s \left(\frac{\partial(h_s + z'_s)}{\partial x} + s_{fx} \right) \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial(u_y h_s)}{\partial t} + \frac{\partial(u_x u_y h_s)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y^2 h_s)}{\partial y} = -gh_s \left(\frac{\partial(h_s + z'_s)}{\partial y} + s_{fy} \right) \quad (2.21)$$

h_s [L] est l'épaisseur de la lame d'eau de surface, z'_s [L] est la côte topographique (le fond de la lame d'eau libre) par rapport à un repère fixe, u_x et u_y [LT^{-1}] sont les composantes de la vitesse suivant les directions x et y , Υ_{2D} [LT^{-1}] est un terme puits-source, g [LT^{-2}] est la valeur scalaire de l'accélération de pesanteur, s_{fx} et s_{fy} [-] sont les pentes de la topographie dans les directions x et y .

Les modèles simplifiés permettent d'alléger la discrétisation du domaine de calcul. Par ordre croissant de simplification, les deux équations de substitution les plus utilisées sont : 1- l'équation d'onde diffusive (Cunge et al., 1980) qui néglige les termes d'accélération locale et convective dans l'équation de la quantité de mouvement, et 2- l'équation d'onde cinématique (Wooding, 1965) qui ne prend pas en compte le terme de force de pression. Les solutions simplifiées offrent de bonnes approximations de la solution des équations complètes de Saint-Venant soit pour des systèmes à faible pente et l'usage de l'onde diffusive), soit de forte pentes et l'usage de l'onde cinématique.

Le modèle physique d'écoulement de surface 2-D dans NIHM repose sur la simplification des équations de Saint Venant en ondes diffusives (Abbott, 1979 ; Equation (2.19) ; Equation (2.20) ; Equation (2.21)) proposée par Di Giammarco (1996), négligeant par conséquent les effets inertiels dans les écoulements. En pratique, cela se traduit par une non prise en compte des variations de vitesse d'écoulement qui se manifestent sur de courtes périodes (inférieures à 10 secondes) et/ou sur des distances inférieures au mètre. La relation

entre hauteur d'eau, vitesse et autres variables d'écoulement est estimée par la formule empirique de Manning. Spécifiquement pour les écoulement de surface, on redéfinit un axe z normal à la topographie (qui n'est pas forcément parallèle au substratum de la nappe, donc la référence z change entre surface et sub-surface), et des axes x et y , orthogonaux à z et formant une base orthonormée.

L'équation de base du modèle de ruissellement de surface 2-D qui en résulte s'écrit :

$$\frac{\partial h_s}{\partial t} - \nabla_{x,y} \left(\mathbf{K}_{2D} \cdot \nabla_{x,y} (h_s + z'_s) \right) = \Upsilon_{2D} \quad (2.22)$$

avec :

$$\mathbf{K}_{2D} = \begin{pmatrix} K_x & 0 \\ 0 & K_y \end{pmatrix}, \quad K_x = \frac{h_s^{5/3}}{N_x^2 \beta(h_s, z'_s)}, \quad K_y = \frac{h_s^{5/3}}{N_y^2 \beta(h_s, z'_s)}$$

$$\beta(h_s, z'_s) = \left(\frac{\left(\frac{\partial (h_s + z'_s)}{\partial x} \right)^2}{N_x^4} + \frac{\left(\frac{\partial (h_s + z'_s)}{\partial y} \right)^2}{N_y^4} \right)^{1/4}$$

N_x et N_y [$L^{-1/3}T$] sont les coefficients de rugosité de Manning dans les directions x et y .

2.1.1.3. Couplage surface-subsurface des écoulements d'eau

Dans le modèle NIHM, le couplage entre les deux domaines est calculé par un terme de flux d'échange du premier ordre, proportionnel à la différence de pression entre les deux compartiments (e.g., Therrien et al., 2005).

$$Q_{ech} = K_{int} \frac{(h_s + z'_s) - h}{l_e} k_r \quad \text{si } h > z_c \quad (2.23)$$

$$Q_{ech} = K_{int} \frac{(h_s + z'_s) - z_c}{l_e} k_r \quad \text{si } h \leq z_c \quad (2.24)$$

$$\text{avec : } k_r = \min \left[\left(\frac{h_s}{h_{bs}} \right)^{2(1-h_s/h_{bs})} ; 1 \right]$$

Une couche d'interface est supposée présente entre les domaines de surface et souterrain et se caractérise par une conductivité hydraulique K_{int} [$L.T^{-1}$] et une épaisseur l_e [L]. On

rappelle que h est la charge hydraulique dans le système de subsurface et $h_s + z'_s$ le potentiel de la lame d'eau libre en surface. z_c [L] est l'élévation du fond de la couche d'interface, k_r [-] est une variable dépendante de h_s comprise entre 0 et 1. h_{bs} [L] est la hauteur totale d'obstruction, composée de la hauteur de stockage dans les micro-dépressions du relief, qui doit être comblée avant que l'écoulement de surface ne se produise. Elle participe à « l'exclusion de stockage » par obstruction, qui réduit la surface disponible pour l'écoulement et pour le stockage de l'eau à cause de la présence de la végétation et des structures de surface (Therrien et al., 2009).

Le terme de couplage est explicitement intégré dans les équations gouvernantes des deux compartiments surface et subsurface, sous la forme d'un terme puits-source. Lorsque le potentiel de la lame d'eau libre est supérieur à la hauteur de la nappe, des échanges se produisent de la lame d'eau libre vers le domaine d'écoulement souterrain sous forme d'infiltrations. Inversement, lorsque le potentiel de la lame d'eau libre est inférieur à la hauteur de la nappe, l'eau souterraine s'exfiltre et alimente l'eau de surface. Les mêmes relations d'échange régiraient les interactions entre le système souterrain et le drainage routé par les rivières.

2.1.1.4. Discrétisation et résolution numérique

Les équations (2.18) et (2.22) sont les équations de base décrivant les écoulements souterrains et de surface dans le modèle NIHM. Ces équations sont non linéaires et ne peuvent être résolues qu'à l'aide de méthodes numériques, en particulier pour des domaines de taille finie à conditions limites variables et en présence d'hétérogénéité de milieu. Les équations (2.18) et (2.22) sont résolues sur un maillage triangulaire et sont discrétisées dans l'espace 2-D par la méthode des éléments finis de Crouzeix-Raviart (EFCR) (Crouzeix et Raviart, 1973), et dans le temps avec un schéma implicite. Les équations sont linéarisées par un schéma itératif de Newton-Raphson caractérisé par une convergence quadratique (Lehmann and Ackerer, 1998).

La résolution du problème de ruissellement de surface dans NIHM peut engendrer des épaisseurs de lame d'eau négatives à l'origine de difficultés dans la convergence des calculs. Ce problème est lié à l'utilisation et à la mise en forme de l'équation non linéaire d'onde diffusive qui ne contraint pas l'épaisseur de la lame d'eau à rester positive ou nulle, puisque c'est le potentiel $h_s + z'_s$ qui contrôle le calcul. Le problème est donc fréquemment rencontré à

l'interface entre zones en eau et zones qui s'assèchent et nécessite des corrections afin de maintenir des épaisseurs de lame d'eau à minima nulles. A chaque pas de temps, NIHM vérifie le signe des épaisseurs au centre des facettes et la valeur nulle est attribuée à chaque hauteur négative détectée. Sur le voisinage des facettes traitées, le bilan de masse est conservé en diminuant les valeurs des hauteurs d'eau positives des facettes adjacentes.

Dans le modèle NIHM, les systèmes d'écoulement de surface et souterrain sont résolus simultanément et de manière couplée. Au lieu de mettre en œuvre la technique de résolution itérative couramment appliquée, la méthode réalisée est basée sur l'idée de résoudre les deux systèmes de manière simultanée au sein d'une seule matrice globale par le solveur UMFPACK.

2.1.2. Le modèle TRACES

Le modèle TRACES servira de référence pour les calculs d'écoulement et transport dans le compartiment souterrain, comparés aux résultats de NIHM. A noter également que le module de transport NIHM-T, transport 2-D de soluté dans les compartiments de subsurface et le ruissellement diffus de surface de NIHM, s'appuie pleinement sur la résolution 2-D du transport implémentée dans TRACES.

TRACES (Transport RéActif de Contaminants dans les Eaux Souterraines) est un modèle de simulation d'écoulement et de transport en milieu poreux qui gère le calcul en régime transitoire ou stationnaire sur des domaines 2-D ou 3-D. TRACES (Hoteit et Ackerer, 2004) se base sur l'équation de Richards pour l'écoulement dans les zones saturée et non saturée et sur l'équation d'advection-dispersion pour le transport de soluté. Cette partie couvre les aspects mathématiques et numériques du modèle TRACES. Les modèles mathématiques pour l'écoulement et le transport seront d'abord décrits. Ensuite, les méthodes de résolution numérique seront expliquées avant de présenter la structure générale du modèle.

2.1.2.1. Le modèle d'écoulement

Le modèle d'écoulement en milieu poreux variablement saturé est décrit par l'équation de Richards, présentée dans la section 2.1.1.1. Des relations constitutives sont nécessaires pour décrire les interdépendances entre la pression, la teneur en eau et la conductivité. Le modèle de

van Genuchten modifié est utilisé (Vogel et al., 2001 ; Ippisch et al., 2006) et peut se présenter comme suit :

$$S_e = \begin{cases} \frac{1}{S_E^*} \left[1 + (\alpha |p|)^n \right]^{-m} & p < -p_a \\ 1 & p \geq -p_a \end{cases} \quad (2.25)$$

$$k_r(S_e) = \begin{cases} S_e^L \left[\frac{1 - (1 - (S_E^* S_e)^{1/m})^m}{1 - (1 - (S_E^*)^{1/m})^m} \right]^2 & S_e < S_E^* \\ 1 & S_e \geq S_E^* \end{cases} \quad (2.26)$$

p_a [L] est la pression d'entrée d'air, α [L⁻¹] est un paramètre de forme lié à la taille moyenne des pores, n [-] un paramètre lié à la distribution des tailles de pores, m [-] un paramètre d'ajustement ($m = 1 - 1/n$), et L [-] un paramètre lié à la tortuosité ($L = 0.5$ selon Mualem). S_e [-] est la saturation effective $S_e = (\theta - \theta_r) / (\theta_s - \theta_r)$, S_E^* [-] est la saturation effective à la pression d'entrée d'air p_a $S_E^* = [1 + (\alpha p_a)^n]^{-m}$, θ_s [-] est la teneur en eau à saturation, θ_r [-] la teneur en eau résiduelle.

Un jeu de 5 paramètres ($\theta_s, \theta_r, n, \alpha, p_a$) est donc nécessaire pour chaque zone du domaine représenté. Il faut noter que le modèle modifié de van Genuchten est équivalent au modèle standard pour une valeur de pression d'entrée d'air nulle. D'autres modèles ont été proposés dans la littérature pour décrire la courbe de rétention d'eau et l'évolution de la conductivité hydraulique. Dans TRACES, les modèles Brooks & Corey, Brusaert et Gardner ou des modèles linéaires peuvent également être sélectionnés.

2.1.2.2. Le modèle de transport des solutés

La description de la migration des contaminants dans les eaux souterraines est essentielle dans de nombreux domaines de l'ingénierie ou de l'agriculture. Plusieurs substances nocives risquent d'atteindre les réservoirs d'eau et menacent la qualité des nappes. Dans un

milieu poreux, les polluants les plus « simples » se présentent généralement sous forme de solutés capables de se déplacer ou d'être adsorbés sur la phase solide du milieu poreux. En l'absence d'effets de réactions, les principaux mécanismes du cheminement des solutés dans les sols et les nappes sont l'advection, la diffusion moléculaire et la dispersion mécanique.

L'advection est l'entraînement des substances dissoutes par le mouvement des fluides solvants (Goblet et al., 1978). Les vitesses d'advection transportant les polluants dans les aquifères sont beaucoup plus lentes qu'en surface, avec une différence d'au moins 4 à 5 ordres de grandeur. Le transfert des solutés par dispersion résulte de la répartition inégale des vitesses d'écoulement à travers les pores du sol et se traduit par un effet de mélange et d'étalement des solutés (Bear, 1979). Le déplacement des polluants dans la zone non saturée est principalement vertical à cause des mécanismes d'advection et de dispersion et peut être plus ou moins rapide en fonction de la perméabilité et de la teneur en eau du milieu.

Le transport de soluté en subsurface dans le modèle TRACES est décrit par l'équation classique d'advection-dispersion (Kiely, 1997 ; Martin et McCutcheon, 1999 ; Deng, 2002) qui est une équation aux dérivées partielles décrivant la progression du soluté polluant dans les milieux souterrains :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = \nabla \cdot (\theta \mathbf{D} \nabla C - \mathbf{q} C) + q_s \quad (2.27)$$

C [ML^{-3}] est la concentration de soluté, θ [-], la teneur en eau (ou la porosité) accessible au drainage du milieu (elle n'intègre pas l'eau liée, ou l'eau piégée dans des microporosité qui ne réagissent pas aux effets gravitaires ou de faibles variations de pression). \mathbf{D} [L^2T^{-1}] est le tenseur de diffusion/dispersion, q_s [$\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$] un terme puits-source.

En pratique, on utilise le coefficient empirique \mathbf{D} regroupant les deux mécanismes de dispersion que sont la diffusion moléculaire et la dispersion mécanique. La diffusion moléculaire, liée à l'agitation thermique (mouvement Brownien) est générée par la quantité de mouvement résultante des molécules. En présence d'un gradient de concentration, un transfert de solutés se produit vers des zones de faibles concentrations (Goblet et al., 1978). A l'échelle macroscopique, la diffusion moléculaire d'un soluté dans fluide homogène est définie par la première loi de Fick. La dispersion mécanique, quant-à-elle, est produite par les fluctuations de la vitesse du fluide dans les pores par rapport à la vitesse moyenne d'écoulement du liquide.

Ces fluctuations de vitesse effective sont la résultante de vitesses hétérogènes entre le cœur et les parois d'un milieu poral et la multiplicité des chemins entre deux points d'un milieu poreux (de Marsily, 1981).

Le tenseur de diffusion/dispersion (Zheng et Bennett, 2002) est présenté sous la forme

$$\mathbf{D} = D_{pm} \mathbf{I} + \mathbf{D}_H \quad (2.28)$$

$$D_{H,i,j} = \alpha_T \|\mathbf{u}\| \delta_{ij} + \frac{(\alpha_L - \alpha_T) u_i u_j}{\|\mathbf{u}\|}$$

$$D_{pm} = D_m \cdot \tau$$

α_L [L] est la dispersivité longitudinale, α_T [L] est la dispersivité transversale, \mathbf{u} [LT^{-1}] est le vecteur vitesse moyenne $\mathbf{u} = \mathbf{q}/\theta$ (\mathbf{q} , vitesse de Darcy), \mathbf{I} [-] la matrice identité. D_{pm} [L^2T^{-1}] est le coefficient de diffusion moléculaire effectif en milieu poreux, D_m [L^2T^{-1}] le coefficient de diffusion moléculaire dans l'eau, et τ [-] est le facteur de tortuosité.

La dispersion ne voit, telle qu'écrite plus haut, que la vitesse moyenne du fluide, qui par contre elle est influencée par les propriétés du fluide. Dans le cas d'un écoulement dont la vitesse est de l'ordre du m par jour, (fréquent en milieu poreux, 10^{-5} ms^{-1}), la diffusion moléculaire est très largement négligeable devant la dispersion mécanique (Bear et Verruijt, 1987).

La dispersivité, comme la conductivité hydraulique, est en théorie une propriété intrinsèque du milieu poreux. Néanmoins elle est fortement dépendante du facteur de l'échelle investie et de distribution des hétérogénéités de milieu à l'échelle considérée (Gelhar et al. 1979). L'estimation des valeurs de la dispersivité s'avère difficile et a donné lieu à de nombreuses études sur le terrain par traçages et essais de pompages et de modélisations statistiques ou déterministes (Freeze et Cherry 1979, Neuman et al. 1987).

La résolution de l'équation de transport exige la définition d'un domaine accompagné de ses conditions initiales et aux limites. Les conditions aux limites et presque tous les paramètres peuvent varier dans l'espace. Les conditions aux limites, les termes puits-sources et les propriétés du fluide et du milieu sont imposées par l'utilisateur et peuvent varier avec le temps sur des intervalles indépendants du pas de temps utilisé pour le calcul du transport.

Les conditions aux limites sont définies sur les arêtes/faces et toutes les arêtes/faces ayant le même type et les mêmes valeurs sont regroupées dans une même zone. De nombreux types de conditions aux limites peuvent être utilisés. Les conditions aux limites possibles dans TRACES sont de :

- Type de Dirichlet : $C(\mathbf{x}, t) = C_D(\mathbf{x}, t) ; \mathbf{x} \in \Gamma_D$
- Type de Neumann : $-(\theta \mathbf{D} \nabla C(\mathbf{x}, t)) \cdot \mathbf{n} = q_N(\mathbf{x}, t) ; \mathbf{x} \in \Gamma_N$
- Type Mixte, ou de Robin : $A(t) \frac{\partial C}{\partial n}(\mathbf{x}, t) + B(t)C(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t) ; \mathbf{x} \in \Gamma_R$

$\Gamma_D, \Gamma_N, \Gamma_R$ étant les limites du domaine de type Dirichlet, Neumann et Robin, respectivement.

2.1.2.3. Résolution numérique

L'équation d'advection-dispersion est difficile à résoudre, surtout qu'elle peut être de type parabolique (dispersion dominante), hyperbolique (advection dominante) ou plus rarement elliptique (transport stationnaire). Cette équation n'admet pas de solution analytique, hormis quelques cas simples qui souvent ne représentent pas les systèmes complexes. Le recours aux méthodes de résolution numérique s'avère ainsi indispensable.

L'équation d'advection-dispersion dans TRACES est résolue sur un maillage triangulaire ou quadrangulaire dans le cas bidimensionnel, et sur des mailles sous forme de tétraèdres, prismes ou hexaèdres dans le cas d'un problème en 3-D. Les méthodes numériques utilisées sont les éléments finis mixtes et discontinus. Ces méthodes garantissent un bilan de masse local exact et sont capables de gérer les discontinuités des paramètres entre les éléments adjacents. Le modèle mathématique qui décrit l'écoulement dans le milieu poreux est résolu par la méthode des éléments finis hybrides mixtes. L'équation de transport est divisée en deux parties – une advective, l'autre dispersive. Les résolutions numériques de chaque partie se font séparément avec des techniques numériques adaptées. La partie dispersive est résolue par la méthode des éléments finis hybrides mixtes en utilisant un schéma implicite en temps. Le terme advectif est de type hyperbolique, résolu par la méthode des éléments finis discontinus. La méthode des éléments finis de Galerkin discontinus est capable de résoudre la partie advective sans oscillations et avec une diffusion numérique très limitée. Ces deux méthodes de résolution numérique seront détaillées dans la section 2.2.2.2 pour l'équation de transport intégré de

NIHM-T. La discrétisation temporelle est basée sur la méthode de Runge-Kutta explicite simplifiée d'ordre 2. Cette méthode explicite peut générer des problèmes de comportement oscillatoire et/ou diffusion numérique, en particulier dans les régions où la convection est dominante. Ces phénomènes indésirables peuvent être évités ou limités en sélectionnant des discrétisations spatiales et temporelles appropriées, grâce à des contraintes associées à deux nombres adimensionnels : les nombres de Peclet et de Courant.

Le nombre de Peclet (P_e) est le ratio des termes de transport par convection et par dispersion ici rapporté à la taille caractéristique d'une maille du modèle :

$$P_e = \Delta x \frac{u}{D_{pm}} \quad (2.29)$$

avec: Δx [L] la taille d'une maille, u [LT^{-1}] la vitesse de l'écoulement.

Le nombre de Peclet peut être calculé à la fois dans les directions longitudinales et transversales lorsque les valeurs de dispersion et de vitesses d'écoulement changent pour chacun des axes. Pour obtenir des résultats numériques acceptables, la résolution spatiale doit être relativement fine pour maintenir un nombre de Peclet bas ne dépassant pas 5 et limiter ainsi la dispersion numérique du terme convectif.

Le deuxième nombre sans dimension, le nombre de Courant (C_r) est étroitement associé à la discrétisation temporelle. Afin d'obtenir des solutions stables sans oscillation, la condition de convergence de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) exige que le nombre de Courant doive rester inférieur à un :

$$C_r = u \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (2.30)$$

avec: Δt [T] et Δx [L] les discrétisations dans le temps et dans l'espace respectivement.

2.2. Construction du modèle de transport intégré à dimension réduite couplé surface-subsurface

Cette section présente les méthodes d'implémentation des processus de transport dans le modèle hydrologique intégré NIHM et les étapes de développement d'une nouvelle version NIHM-T capable de décrire les écoulements de l'eau et le transport des solutés, en se basant sur une approche à dimension réduite couplée surface-subsurface.

2.2.1. Les étapes de la construction du modèle de transport non réactif NIHM-T

Le modèle NIHM a été déjà évalué et appliqué à des hydrosystèmes réels pour décrire les écoulements d'eau (e.g., Jeannot et al., 2018, 2019). Il a prouvé sa capacité de capturer les réponses hydrologiques diverses et de réduire considérablement le cout de calcul, même à partir de systèmes complexes sans pour autant aborder le transfert de masse. La pertinence d'une approche à dimension réduite pour la modélisation du transport n'est pas encore prouvée, d'autant que la réduction de la dimensionnalité du problème risque de biaiser les champs de vitesse nécessaires à la résolution des phénomènes de transfert de masse en solution.

Le modèle TRACES s'est révélé assez robuste pour calculer le transport de soluté en subsurface. Cependant, il est couteux en termes de temps calcul, en particulier pour les systèmes tridimensionnels. Par ailleurs, il ne permet pas de simuler le transport de soluté en surface ni de prendre en compte les interactions entre processus de surface et de subsurface.

La construction du modèle NIHM-T consiste à coupler le modèle NIHM et un module de transport de soluté 2-D pleinement hérité de TRACES, le tout de manière non intrusive, chacun des codes « écoulement » et « transport » étant suffisamment complexes. Autre intérêt, la possibilité d'utiliser des maillages différents entre écoulement et transport, en fonction des spécificités numériques de chaque résolution. Enfin pour des problèmes de transport de soluté où les concentrations n'influent pas sur l'écoulement (au plus simple pas d'effet de contrastes densitaires), le transport n'a besoin que des champs de vitesses. En découplant partiellement écoulement et transport dans deux résolutions indépendantes, on peut filtrer les champs de vitesse passés au transport. Le fait est d'autant plus intéressant que ces champs sont souvent calculés à pas de temps courts imposés par la résolution de l'écoulement (non-linéaire), alors que les vitesses effectives varient peu. L'implémentation « transport » de TRACES 2-D constitue la base pour la mise en place des modules de transfert de soluté en subsurface à dimension réduite puis en surface. Ensuite, les échanges entre les deux compartiments y seront également implémentés. Les parties subsurface et surface du modèle NIHM-T seront évaluées et validées séparément avant d'appliquer la version finale intégrée sur des cas synthétiques et réel (voir Chapitre 3 et Chapitre 4).

2.2.2. Modèle de transport de solutés en subsurface à dimension réduite

2.2.2.1. Equations de base du modèle de transport

Le modèle souterrain de transport de soluté à dimension réduite est établi à partir d'une approche de réduction similaire à celle présentée précédemment pour le modèle d'écoulement souterrain dans NIHM, en l'appliquant cette fois à l'équation classique d'advection-dispersion (Equation (2.27)).

La réduction de la dimensionnalité du problème de transport s'effectue en intégrant l'équation (2.27) le long d'une direction normale à la base de l'aquifère, dans un système de coordonnées eulérien local défini par les directions notées (x, y) dans le plan du substratum et z direction normale au substratum. Les bornes d'intégration correspondent aux coordonnées du substratum et de la surface topographique dans la direction z :

$$\int_{z_b}^{z_s} \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} dz = \int_{z_b}^{z_s} \nabla \cdot (\theta \mathbf{D} \nabla C) dz + \int_{z_b}^{z_s} \nabla \cdot (-\mathbf{q} C) dz + \int_{z_b}^{z_s} q_s dz \quad (2.31)$$

On suppose que le domaine est peu déformable et que les bornes d'intégration z_b et z_s ne varient pas dans le temps. En appliquant la règle de Leibnitz au terme de gauche de l'équation (2.31), on obtient :

$$\int_{z_b}^{z_s} \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} dz = \frac{\partial}{\partial t} \int_{z_b}^{z_s} (\theta C) dz - \theta(t, z_s) C(t, z_s) \frac{\partial(z_s)}{\partial t} + \theta(t, z_b) C(t, z_b) \frac{\partial(z_b)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{z_b}^{z_s} (\theta C) dz \quad (2.32)$$

On suppose également que l'épaisseur de l'aquifère varie peu sur la taille d'un ou de quelques éléments du domaine. Ainsi, les limites d'intégration z_s et z_b sont de gradient local négligeable. En appliquant la règle de Leibnitz aux termes d'espace de l'équation (2.31) et annulant les gradients de z_s et z_b , l'équation (2.31) se réécrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{z_b}^{z_s} (\theta C) dz = \nabla \cdot \int_{z_b}^{z_s} (\theta \mathbf{D} \nabla C) dz + \nabla \cdot \int_{z_b}^{z_s} (-\mathbf{q} C) dz + Q_s \quad (2.33)$$

Q_s est l'intégrale locale du terme puits-source le long de la direction z .

Le modèle à dimension réduite considère qu'il y a un équilibre hydrostatique instantané le long de la direction z , qui se traduit par un profil de vitesses parallèle au substratum. NIHM « Ecoulement » en sortie standard, ne produit qu'un flux de Darcy moyen sur la direction z . Il

aurait été possible de redistribuer ce flux au prorata des conductivités hydrauliques sur la verticale et recréer un champ de vitesse 2-D multicouches sans composantes selon z . C'eut été alors perdre en partie l'intérêt de la réduction de dimensionnalité et cette option n'a pas été retenue. En l'absence de composants d'écoulement le long de la direction z , et pour un flux moyen de Darcy sur la direction z , le transport de soluté se ramène également à un problème bidimensionnel, en manipulant une concentration moyenne et des paramètres de transport uniformes sur z . La concentration moyenne (qui reste notée C ci-dessous), ne dépend donc pas de z et est ainsi extraite des intégrales sur cette direction normale. On obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(C \int_{z_b}^{z_s} \theta(z) dz \right) = \nabla_{x,y} \cdot \left(\int_{z_b}^{z_s} \theta \mathbf{D}(z) dz \right) \nabla_{x,y} C - \nabla_{x,y} \cdot \left(C \int_{z_b}^{z_s} \mathbf{q}(z) dz \right) + Q_s \quad (2.34)$$

avec $\nabla_{x,y}$ les opérateurs divergence ou gradient restreints aux directions (x, y) qui forment une base orthonormée du plan normal à z .

En simplifiant la notation dans l'équation (34) et en introduisant les paramètres intégrés, on obtient :

$$\frac{\partial(\bar{\theta} C)}{\partial t} = \nabla_{x,y} \cdot (\bar{\theta} \bar{\mathbf{D}} \nabla_{x,y} C - \bar{\mathbf{q}} C) + Q_s \quad (2.35)$$

avec: $\bar{\theta} = \int_{z_b}^{z_s} \theta(z) dz$, $\bar{\mathbf{q}} = \int_{z_b}^{z_s} \mathbf{q}(z) dz$, $\bar{\theta} \bar{\mathbf{D}} = \int_{z_b}^{z_s} \theta \mathbf{D}(z) dz$. On notera que le flux moyen $\bar{\mathbf{q}}$ n'a pas besoin d'être calcul, étant par ailleurs fourni par les sorties de NIHM "écoulement".

2.2.2.2. Résolution numérique de l'équation d'advection-dispersion en subsurface dans NIHM-T

L'équation (2.35) peut s'écrire comme :

$$\bar{\theta} \frac{\partial(C)}{\partial t} + \bar{\mathbf{q}} \nabla_{x,y} \cdot (C) + C \underbrace{\left(\frac{\partial(\bar{\theta})}{\partial t} + \nabla_{x,y} \cdot (\bar{\mathbf{q}}) \right)}_d = \nabla_{x,y} \cdot (\bar{\theta} \bar{\mathbf{D}} \nabla_{x,y} C) + Q_s \quad (2.36)$$

Si l'équation d'écoulement est préalablement résolue, le terme d est soit nul, soit correspond à un terme puits-source (en fluide) qui éventuellement peut porter des concentrations. Dans ce cas, d s'avèrera également un terme puit-source du transport s'ajoutant ou se substituant au terme Q_s de (36). Sans perte de généralité, on peut donc reformuler (2.36) selon :

$$\bar{\theta} \frac{\partial(C)}{\partial t} + \bar{\mathbf{q}} \nabla_{x,y} \cdot (C) = \nabla_{x,y} \cdot (\bar{\theta} \mathbf{D} \nabla_{x,y} C) + Q_s \quad (2.37)$$

La résolution de l'équation d'advection-diffusion intégrée est réalisée à partir du modèle TRACES et se base sur des techniques de time splitting. Comme mentionné dans la section 2.1.2.3, une telle procédure consiste à résoudre d'abord l'équation d'advection et ensuite l'équation de diffusion séparément avec des pas de temps différents, afin d'adopter la méthode numérique la plus adaptée à chaque type d'équation aux dérivées partielles.

a- La méthode des éléments finis de Galerkin discontinus pour l'équation d'advection

La méthode des éléments finis de Galerkin discontinus est un schéma discret de haute résolution pour l'advection qui se caractérise par une précision d'ordre élevé et des solutions exemptes d'oscillations parasites. Cette méthode a été appliquée aux problèmes hyperboliques monodimensionnels, puis généralisée aux problèmes multidimensionnels à l'aide des limiteurs de pente dans le contexte des lois de conservation (Cockburn et Shu, 1998). Le phénomène d'advection n'augmente pas la variation de concentration dans le domaine. Par conséquent, la solution doit diminuer ou maintenir la variation totale (TVD- Total Variation Diminishing) et des limiteurs de pente peuvent être utilisés pour éviter les oscillations. Une présentation détaillée des méthodes TVD et des limiteurs de pente peut être trouvée dans le livre de Toro (Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics, 1997).

On applique la méthode des éléments finis de Galerkin discontinus à la partie hyperbolique de l'équation de transport :

$$\frac{\partial(C)}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \nabla_{x,y} \cdot (C) = 0 \quad (2.38)$$

avec : $\bar{\mathbf{u}} = \frac{\bar{\mathbf{q}}}{\theta}$

L'équation (2.38) peut se réécrire en :

$$\frac{\partial(C)}{\partial t} = - \nabla_{x,y} \cdot (\bar{\mathbf{u}} C) + C (\nabla_{x,y} \cdot (\bar{\mathbf{u}})) \quad (2.39)$$

La formulation variationnelle est obtenue en multipliant (2.39) par une fonction test v et en intégrant sur l'élément discret A d'un maillage du domaine traité:

$$\int_A \frac{\partial(C)}{\partial t} v dx + \int_A \bar{\mathbf{u}} C \cdot \nabla v dx - \sum_{l=1}^3 \int_{A_l} v C \bar{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n} dl = \int_A C (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}) v dx \quad (2.40)$$

\mathbf{n} est le vecteur unitaire normale sortant de l'élément

On définit le domaine physique Ω discrétisé en éléments triangulaires $\{A\}$. La méthode de Galerkin discontinue est une méthode de résidus pondérés caractérisée par une approximation polynomiale à partir des fonctions tests polynomiales. Le principe de la méthode consiste à résoudre le problème en utilisant l'espace vectoriel de dimension finie défini par :

$$V_h = \{v \in L^\infty(\Omega) : v_{h/A} \in V(A)\} \quad (2.41)$$

avec : $V(A)$ l'espace d'approximation sur l'élément A .

Lorsque le schéma explicite est utilisé, l'équation est soumise à des contraintes de stabilité. Le critère de convergence CFL doit être respecté pour tous les éléments du domaine.

Le nombre CFL est défini pour chaque élément triangulaire A comme suit :

$$CFL_A = \frac{\sum_{i=1}^3 |Q_{\Gamma_i}^A|}{2|A|} \Delta t \quad (2.42)$$

$Q_{\Gamma_i}^A$ sont les flux d'eau à travers chaque arête Γ_i .

Le pas de temps est choisi tel que :

$$\Delta t \leq \min_A \left(\frac{2|A|}{\sum_{i=1}^3 |Q_{\Gamma_i}^A|} \right) \quad (2.43)$$

b- La méthode d'éléments finis mixtes hybrides pour l'équation de diffusion

L'équation de diffusion est discrétisée avec la méthode des éléments finis mixtes hybrides en temps implicite sur des mailles triangulaires qu'on note $\{A\}$. La méthode des éléments finis mixtes est localement conservatrice et convient aux domaines hétérogènes même avec des coefficients de diffusion anisotropes. Elle peut gérer des maillages irréguliers et permet de calculer simultanément des approximations de la concentration et du flux dispersif (El Soueidy et al., 2009).

L'équation de diffusion s'écrit :

$$\bar{\theta} \frac{\partial(C)}{\partial t} + \nabla_{x,y} \cdot (\bar{\mathbf{q}}_d) = 0 \quad (2.44)$$

$$\text{avec : } \bar{\mathbf{q}}_d = -\overline{\theta \mathbf{D}} \cdot \nabla_{x,y} C$$

2.2.2.3. Stratégie de couplage de NIHM et du module transport de TRACES

La mise en œuvre de l'approche de transport à dimension réduite se base sur un couplage non intrusif de la version de NIHM détaillée par Jeannot et al. (2018), avec un modèle de transport de soluté en subsurface fondé sur les algorithmes implémentés dans TRACES 2-D. Un tel couplage exige d'abord la séparation des modules d'écoulement et de transport de TRACES afin de permettre au modèle de transport de fonctionner de façon autonome. La création d'une interface utilisateur indépendante pour le modèle de transport s'avère également indispensable pour pouvoir lire les paramètres d'entrée qui lui sont relatifs.

Le modèle NIHM est utilisé pour résoudre l'écoulement à dimension réduite et produire les teneurs en eau intégrées et les champs de vitesses nécessaires pour la résolution de l'équation de transport (Equation (2.35)). L'équation de transport souterrain nécessite des valeurs des flux moyens (vitesse de Darcy intégrés sur une direction perpendiculaire à l'écoulement) d'eau et des teneurs en eau issues de la résolution de l'équation d'écoulement souterrain. Les sorties du modèle d'écoulement sont stockées puis transférées au modèle de transport aux instants correspondants. Pour éviter une éventuelle perte de précision, les deux modèles partagent le même maillage triangulaire, en veillant à respecter la convention de numérotation des nœuds spécifique à chaque modèle.

Par défaut, les variables en sortie de NIHM sont enregistrées à chaque pas de temps. Ces pas de temps peuvent être très petits en raison de la non-linéarité de l'équation d'écoulement de surface et de la subsurface en contexte non saturé. Pour réduire les besoins de stockage et le coût de calcul nécessaire pour résoudre le problème de transport, les résultats de NIHM peuvent être conservés à des pas de temps sélectionnés. Un module de filtrage des champs de vitesse a été développé et permet de sauvegarder uniquement une partie des données de sorties d'écoulement, à partir d'un critère basé sur la variation locale de la vitesse entre les pas de temps. Si la différence de vitesse entre deux pas de temps successifs au niveau d'un élément du maillage est supérieure à 1%, les données sur les champs de vitesses et les teneurs en eau sont enregistrées. Sinon, ces données sont moyennées sur $n-1$ pas de temps successifs jusqu'à ce que

la différence des vitesses locales entre les temps t_1 et t_n soit supérieure à 1% au niveau d'au moins un élément du maillage.

Dans le modèle de transport de solutés, les paramètres temporels (pas de temps initial, schéma d'approximation en temps et coefficients associés) sont définis par l'utilisateur. Un module de lecture des données de sorties de NIHM a été développé pour s'assurer une attribution correcte des variables aux instants correspondants, en adaptant les pas de temps de façon automatique. Les choix des pas de temps pour tous les cas tests et applications présentés dans ce travail garantissent le respect du critère de Courant et éviter les oscillations et réduire la diffusion numérique (Péclet à l'échelle de la maille élémentaire).

2.2.3. Implémentation du modèle de transport de solutés en surface

On s'intéresse dans cette partie aux processus de transfert de solutés en eaux peu profondes à surface libre. Le transport de solutés représente une source majeure de pollution dans les eaux de surface. Les contaminants transportés en surface sont les principaux contributeurs à la détérioration de la qualité de l'eau (Deng et al., 2005 ; Yang et al., 2016a ; Yang et al., 2016b). Ces polluants peuvent provenir des pesticides appliqués en surface, des nutriments et d'autres produits chimiques. La modélisation du transfert de solutés en surface constitue un outil important pour l'aide à la prise de décision et à la gestion des problématiques associées à la pollution des eaux de surface.

Le modèle TRACES ne simule pas le transport en surface. Un modèle de transport de solutés en surface a été implémenté dans le modèle NIHM-T à partir d'une démarche de séparation du module de transport de TRACES et de couplage avec NIHM similaire à celle présentée pour le module de transport à dimension réduite en subsurface. Une attention particulière a été portée à la définition des paramètres et des variables dans le modèle de surface.

Le transport des solutés est généralement décrit par l'équation d'advection-dispersion (ADE) présentée précédemment. En surface, l'ADE peut être exprimé comme :

$$\frac{\partial(h_s C_s)}{\partial t} = \nabla \cdot (h_s \mathbf{D}_s \nabla C_s - h_s \mathbf{u}_s C_s) + q_r \quad (2.45)$$

h_s [L] est l'épaisseur de la lame d'eau de surface, \mathbf{u}_s [LT^{-1}] représente le vecteur vitesse moyen, C_s [ML^{-3}] est la concentration de soluté en surface, \mathbf{D}_s [L^2T^{-1}] le tenseur de diffusion/dispersion, q_r [$\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$] un terme puits-source.

Pour le transport de solutés en surface, le tenseur de dispersion est généralement négligeable par rapport aux autres termes (Abbott et Refsgaard, 1996 ; Wallach et al., 2001), soit encore un transport essentiellement convectif.

2.2.4. Développement du modèle de transport à dimension réduite couplé surface-subsurface

La modélisation couplée du transport des solutés soulève généralement beaucoup de difficultés en raison des interactions complexes entre les processus de surface et de subsurface. Les échanges de solutés entre les compartiments de surface et souterrain se produisent à la fois par advection et par dispersion (uniquement pour le système souterrain si cette même dispersion est négligée en surface). Une modélisation tridimensionnelle couplée du transfert de solutés dépend fortement de la conceptualisation de l'advection et de la dispersion à l'interface surface-subsurface et s'appuie généralement sur la représentation des échanges entre la lame ruisselante et une couche conceptuelle de sol ou sur l'application de conditions aux limites à l'interface qui assurent la continuité des variables de surface et de subsurface (e.g., Weill et al., 2011). De telles procédures de couplage s'avèrent souvent compliquées à mettre en œuvre et sensibles aux différents paramètres.

Pour réduire la complexité du problème, le modèle de transport NIHM-T propose une stratégie de couplage bidimensionnelle fondée sur un terme d'échange surface-subsurface calculé pour chaque élément et capable de combiner les flux d'échange générés par des mécanismes d'advection et de dispersion :

$$F_{ech} = Q_{ech}C^* + \alpha_c(C - C_s) \quad (2.46)$$

avec: Q_{ech} [L.T^{-1}] est le flux d'échange calculé pour le problème d'écoulement, C^* [ML^{-3}] représente soit la concentration de soluté en surface (C_s [ML^{-3}]) lors de l'infiltration soit sa concentration en subsurface (C [ML^{-3}]) lors de l'exfiltration, α_c [L] est la dispersivité de couplage à travers l'interface surface-subsurface. Elle caractérise les interactions diffusives

entre les deux compartiments et se décrit comme un paramètre utile pour la calibration (VanderKwaak, 1999). Les conditions atmosphériques ne sont pas prises en considération.

Cette stratégie de couplage sépare les termes advectif et dispersif et offre ainsi une certaine flexibilité au modèle pour gérer les mécanismes d'échange à prendre en compte. En raison de l'importance de quantifier les effets des échanges diffusifs et d'évaluer le choix de valeurs appropriées du paramètre α_c , le terme dispersif nécessite d'être examiné plus en détails en faisant l'objet d'une étude approfondie et ne sera pas inclus dans les applications présentées dans les chapitres suivants.

Les interactions de solutés sont donc représentées par des flux d'advection unidimensionnels en circulant les données des échanges entre les modules de surface et de subsurface (Figure 2.2). Le transport de soluté est lié à la résolution des équations d'écoulement de surface et de subsurface et dépend fortement des conditions du problème d'écoulement. Un programme a été écrit pour créer une interface entre le modèle d'écoulement NIHM et le modèle de transport couplé afin d'améliorer l'efficacité de calcul et d'accéder automatiquement aux fichiers de sorties de NIHM liés aux écoulements de surface et souterrain et aux flux d'eaux échangés. Cette interface permet également de filtrer les données de sorties comme présenté dans la section 2.2.2.3 et de contourner l'interface utilisateur du modèle d'écoulement de TRACES en interagissant directement avec une série de fichiers de NIHM stockés pour chaque nœud ou face de calcul. Les effets des concentrations de soluté sur l'écoulement sont négligés.

Modèle NIHM-T

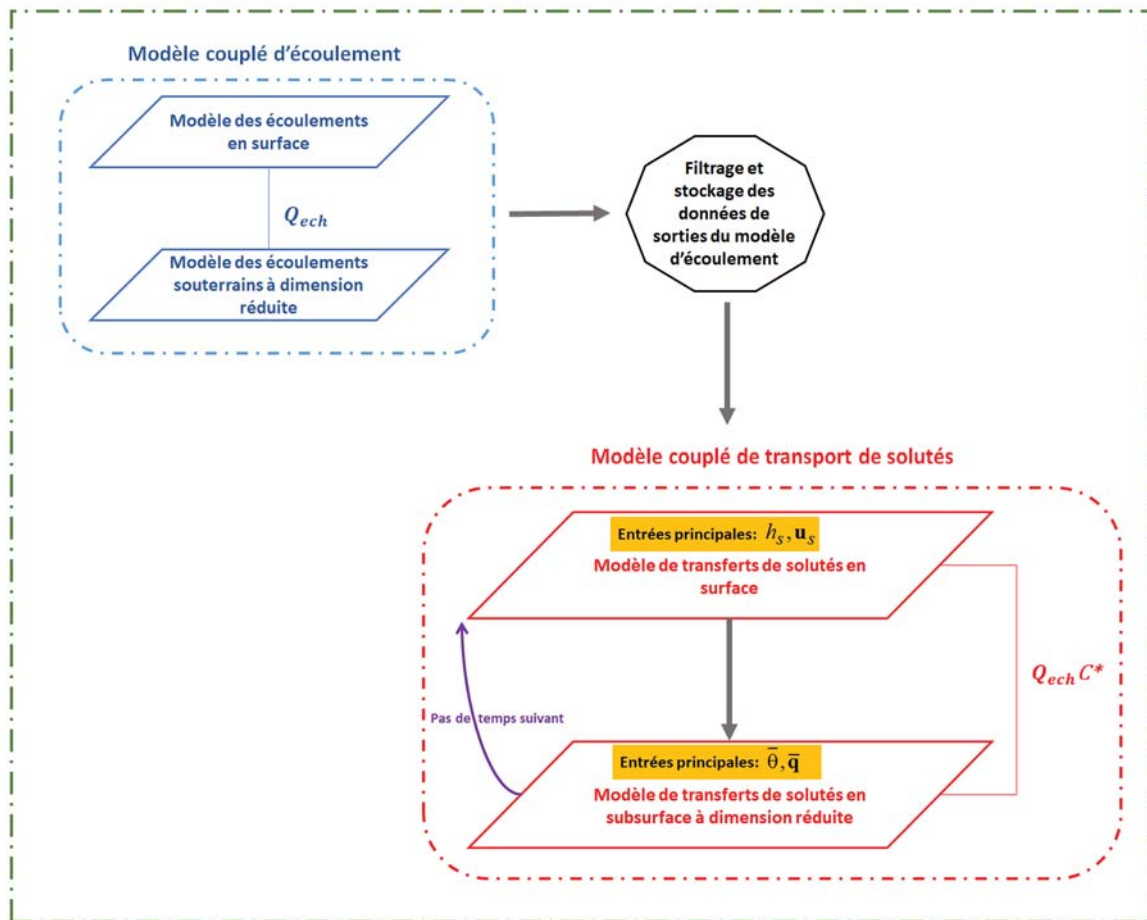


Figure 2.2 : Schéma représentant l'algorithme de calcul du modèle NIHM-T et la stratégie de couplage surface-subsurface

A chaque pas de temps t_n , dès que le problème d'écoulement couplé est simulé, les profils de concentration de soluté sont calculés en deux étapes de façon séquentielle en passant d'abord par le modèle de transport de soluté en surface puis par le module souterrain et en intégrant un tableau de valeurs de concentration C^* mises à jour pour le terme d'échange de solutés (Figure 2.2). Les solutions de concentration à la fin du pas de temps t_n sont ensuite utilisées comme conditions initiales pour le pas de temps suivant t_{n+1} . Ce processus est répété pendant toute la période de simulation fixée par l'utilisateur.

Lorsque la lame ruisselante h_s est très petite, des phénomènes d'instabilités numériques ont été soulevés. Ce problème est traité en imposant une épaisseur minimale de lame d'eau de surface. En présence de précipitations, le choix de la valeur de coupure $h_{s,\min}$ doit permettre d'éviter les problèmes d'instabilités numériques sans entraîner une perte significative des effets d'accumulation en surface. Pour améliorer le bilan de masse, les termes sources sont ensuite convertis en masse pour préserver des valeurs correctes de masse échangée entre les compartiments de surface et de subsurface dans le cas de variations des pas de temps Δt .

2.3. Bilan sur l'implémentation du module de transport dans le modèle hydrologique intégré à dimension réduite

Dans ce chapitre, nous avons présenté les outils de modélisation utilisés et/ou développés dans le cadre de cette thèse pour simuler correctement les écoulements d'eau et le transport de solutés dans un milieu poreux, tout en réduisant la complexité du problème et le coût de calcul. Cette partie explicite l'approche réduite étendue aux problèmes de transport de solutés et met en lumière les différentes étapes de construction du modèle de transport intégré à dimension réduite couplé surface-subsurface aboutissant au développement de la version NIHM-T. L'implémentation d'un module de transport dans NIHM a posé des défis liés au couplage de ce modèle réduit avec un autre modèle de structure différente, à la gestion des données d'entrée et de sortie et à la préservation de la stabilité numérique. Le tout en s'assurant de respecter les lois de la physique et la conservation du bilan de masse pour une représentation correcte des processus étudiés.

Pour apprécier la pertinence du modèle NIHM-T, le modèle sera évalué dans des contextes différents. La précision de calcul et l'efficacité des résultats du modèle de transport dans chacun des compartiments seront d'abord examinés dans le Chapitre 3 à travers des cas tests synthétiques sous différentes conditions hydrodynamiques, afin d'évaluer l'influence de la réduction de la dimensionnalité sur les simulations de transport de soluté. La version complète couplée surface-subsurface du modèle NIHM-T sera ensuite appliquée à des cas tests synthétique et réel présentés dans le Chapitre 4 afin d'évaluer sa capacité à étudier les processus de transport des solutés et à reproduire les interactions surface-subsurface.

Chapitre 3 : Evaluation du modèle de subsurface à dimension réduite

Les premières simulations réalisées dans Pan et al. (2015) et Jeannot et al. (2018) ont permis de valider la capacité du modèle d'écoulement à dimension réduite NIHM ; notamment simuler les flux d'eau dans des milieux hétérogènes, et analyser sa sensibilité à différents paramètres, comme, par exemple, l'épaisseur de l'aquifère et la pente du sol. Très peu de travaux se sont intéressés à l'évaluation du potentiel des modèles à dimension réduite cherchant à reproduire les dynamiques de transfert de solutés. Le Chapitre 3 est exclusivement consacré à l'évaluation de la version NIHM-T dédiée au transport dans le compartiment souterrain et développée dans ce travail de thèse. La version couplée du modèle NIHM-T, transport de surface et de subsurface, sera examinée ultérieurement au Chapitre 4 .

L'évaluation du modèle de transport souterrain à dimension réduite passe majoritairement par l'analyse de sa capacité à reproduire la physique des processus de transport et son efficacité en termes de temps calcul. L'approche choisie compare, sur des cas-tests synthétiques, les résultats produits par le modèle écoulement et transport à dimension réduite et ceux d'un modèle complet TRACES-3D pris comme référence dans la mesure où il résout l'équation de Richards 3-D couplée à l'équation d'advection-dispersion. L'analyse des simulations du modèle NIHM-T s'appuie sur des indicateurs statistiques et quantitatifs de la distribution spatiale du panache et l'estimation du gain en temps de calcul par rapport au modèle TRACES 3-D. Etant donné que l'écoulement 2-D de NIHM simplifie les processus d'infiltration en zone non saturée, une étude de sensibilité, en transport, à l'épaisseur de la zone non saturée est également menée. L'idée est d'évaluer les conditions selon lesquelles les approximations faites sur l'écoulement impactent la qualité des résultats produits en transport.

3.1. Outils d'étude du transport de solutés et d'évaluation de la performance du modèle

Plusieurs outils d'évaluation peuvent être trouvés dans la littérature pour quantifier les processus de transport de solutés dans les nappes d'eau souterraines et examiner la performance

d'un modèle. Nous présentons dans cette section les outils que nous avons choisi pour effectuer la comparaison entre les résultats obtenus par l'approche à dimension réduite et le modèle complet TRACES 3-D.

3.1.1. Evolution du panache de soluté dans le temps

Les résultats quantitatifs du transfert d'un soluté sont souvent décrits par des courbes de restitution (BTC - breakthrough curve) qui représentent la concentration du soluté récupérée au cours du temps sur un ou plusieurs points de surveillance. Le calcul et l'analyse des BTC permettent d'étudier le transport d'un contaminant et ses changements de concentration dans un milieu poreux. La courbe de restitution d'un soluté en différentes positions à aval d'une injection est également une caractérisation de la distribution des temps d'arrivée du contaminant en diverses positions données.

Les concentrations fournies par les simulations 2-D de NIHM-T sont des valeurs moyennées sur la direction perpendiculaire au substratum de la nappe (cf. Chap. 2). Dès lors, une comparaison équitable avec les résultats 3-D nécessite que les concentrations fournies par les simulations 3-D soient post-traitées pour évaluer des valeurs moyennées selon cette même direction. Pour qu'une concentration moyennée soit conservative des flux massiques distribués sur la verticale, la concentration moyenne est une valeur pondérée par la distribution verticale des flux (cf. Equation (3.1)). Ne prendre que la moyenne arithmétique des concentrations serait nier que le 2-D fait porter une concentration moyenne par un flux moyen. En supposant que le domaine 3-D à une position (x, y) est discrétisé en N_L éléments le long de la direction z , la concentration moyennée sur la profondeur s'écrit:

$$\bar{C}_E = \frac{\sum_{j=1}^{N_L} C_j Q_j}{\sum_{j=1}^{N_L} Q_j} \quad (3.1)$$

avec $C_j [\text{ML}^{-3}]$ la concentration du soluté en subsurface dans l'élément j du maillage 3-D, et $Q_j [\text{ML}^{-3}]$ le flux d'eau associé.

3.1.2. Analyse des moments

L'approche des moments spatiaux consiste à caractériser les propriétés « statistiques » du panache de contaminants. Cette méthode est assez classique en mécanique des fluides et a été introduite pour la première fois par Taylor (1953) puis par Aris (1956). Les moments de concentration à différents ordres, calculés à des instants donnés, contiennent des informations sur l'évolution dans le temps et dans l'espace de la structure du panache.

Le moment spatial d'ordre zéro correspond à la masse totale de soluté dans le système. Le moment spatial d'ordre 1 renvoie la position moyenne du panache, soit encore la position du centre de masse. Le moment spatial (centré) d'ordre 2 correspond à la variance et indique l'étalement de la masse. La variance informe sur la dispersion et sur la forme du panache de soluté.

Les moments spatiaux sont bien adaptés à la comparaison de méthodes très différentes de résolution de transport (ici 2-D versus 3-D) car ils ne cherchent la précision locale des valeurs de concentrations de la simulation de transport, mais examinent plutôt le comportement général du système. En pratique, dans de nombreuses applications, une représentation précise des valeurs locales des concentrations n'offre guère d'intérêt attendu que la confrontation aux mesures est impossible sans un réseau dense et coûteux d'observations. La comparaison des moments calculés à partir des approches réduites 2-D et complètes 3-D peut également mettre en lumière des éventuels écarts associés aux distributions des concentrations (et des vitesses) le long de la direction z dans la configuration 3-D et non pris en compte par les calculs du modèle à dimension réduite.

Les moments spatiaux d'ordre un et deux dépendent de la direction selon laquelle ils sont calculés. Dans les différents cas tests discutés ensuite, ces moments sont établis uniquement le long de la direction x correspondant à la direction principale d'écoulement de tous les tests. Les moments spatiaux s'écrivent :

$$M^0 = \sum_{E=1}^{NM} C_E \theta_E A_E \quad (3.2)$$

$$M_x^1 = \frac{\sum_{E=1}^{NM} C_E \theta_E A_E x_{gE}}{M^0} \quad (3.3)$$

$$M_x^2 = \frac{\sum_{E=1}^{NM} C_E \theta_E A_E x_{gE}^2}{M^0} - (M_x^1)^2 \quad (3.4)$$

avec M^0 [M] le moment d'ordre zéro, M_x^1 [L] le moment d'ordre un dans la direction x , et M_x^2 [L²] le moment centré d'ordre deux dans la direction x . E est l'indice d'un élément 2-D ou 3-D du maillage, θ_E [-] la teneur en eau moyenne dans l'élément E , x_{gE} [L] la coordonnée x du centre de l'élément E , A_E [L³] la surface (le volume) de l'élément E , et NM le nombre total d'éléments dans le domaine. Il faut noter que pour les simulations 3-D, les concentrations C_E dans le calcul des moments ne sont pas moyennées le long de la direction z .

3.2. Tests synthétiques

La réduction de la dimensionnalité du problème d'écoulement souterrain permet d'obtenir des champs de vitesse simplifiés sans entraîner d'erreurs importantes sur les valeurs de charges et de flux d'eau collectés à différentes échelles du système - exfiltration vers la surface, débits à l'exutoire du bassin versant, ou fuites à travers une condition aux limites du sous-sol (Pan et al., 2015 ; Jeannot et al., 2018, 2019). Le modèle NIHM-T représente le transport du soluté en subsurface le long d'une ligne de courant unique faisant la moyenne des diverses lignes (en 3-D) empilées le long de la direction z . Une telle approche pourrait ne pas correctement reproduire le transfert de soluté qui se distribue généralement sur différentes lignes de courant. Ainsi, pour fins d'évaluation de la capacité du modèle réduit à décrire les processus d'écoulement et de transport en subsurface, neuf scénarios différents ont été spécifiquement conçus et sont discutés dans cette partie.

3.2.1. Cas tests du pavé régulier

3.2.1.1 Géométrie et maillage

Les scénarios S1 à S5 et SB1 à SB3 reposent sur la configuration de domaine représentée en Figure 3.1. La géométrie étudiée est sciemment établie pour simplifier les diverses interprétations qui seront données lors de la comparaison des simulations de transport 3-D et 2-D intégré. Le domaine est un parallélépipède de dimensions $100 \text{ m} \times 20 \text{ m} \times 10 \text{ m}$ qui représente un aquifère libre synthétique. Les élévations du fond et du sommet du domaine sont fixées à 0 m et 10 m, respectivement. Dans le modèle TRACES 3-D qui servira de référence pour la comparaison, le maillage de l'ensemble du domaine est composé de 56 000 éléments hexaédriques de taille uniforme (1 m) sur les directions x et y . Pour améliorer la stabilité numérique et fournir des solutions précises dans la zone non saturée souterraine d'infiltration, le maillage est davantage raffiné sur le premier mètre près de la surface, le long de la direction verticale z . Par conséquent, le modèle souterrain dans TRACES-3D est discrétisé en 28 couches horizontales d'épaisseur croissante allant de 10 cm au sommet jusqu'à 50 cm pour la couche la plus profonde. Le maillage dans le modèle 2-D à dimension réduite est composé de 4 000 éléments triangulaires et 2 121 nœuds. Il est obtenu en divisant en deux les facettes horizontales rectangulaires de la première couche du maillage 3-D. Pour les comparaisons des BTC, la concentration d'un "élément" calculée par le modèle NIHM-T se réfère à la moyenne des concentrations des deux mailles séparées à partir de la grille 3-D (pour correspondre au maillage horizontal du domaine 3-D), et la concentration d'un "élément" calculée par le modèle TRACES 3-D est moyennée sur les 28 couches (cf. Equation (3.1)).

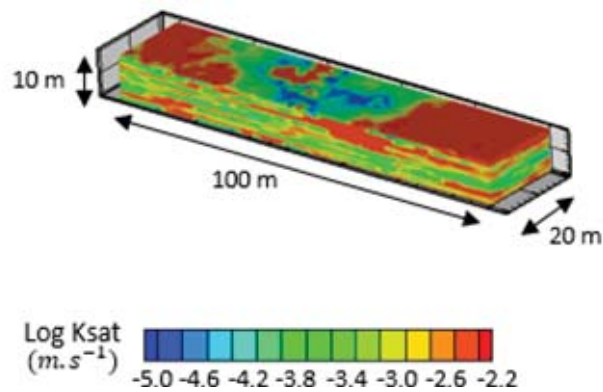


Figure 3.1 : Géométrie du modèle et champ de conductivité hydraulique associé de la subsurface.

3.2.1.2. Description des paramètres

Le transport des solutés par les eaux souterraines dépend de la variabilité spatiale de la conductivité hydraulique. Dans cette section, nous considérons deux types différents de structures hétérogènes.

Dans un premier temps, les scénarios d'écoulement et de transport de solutés S1 à S5 ont été réalisés dans un système souterrain caractérisé par une distribution hétérogène de la conductivité hydraulique. Le \log_{10} des conductivités hydrauliques obéit à un variogramme sphérique de moyenne -3.5, de variance 1.0 (conductivités exprimées en m.s^{-1}), et de longueur de corrélation 60 m et 15 m dans les directions horizontale et verticale, respectivement (Figure 3.1). Le champ a été généré à l'aide d'une simulation séquentielle gaussienne décrite dans GSLIB (Geostatistical Software Library, Deutsch and Journel, 1997).

Dans un second temps, les scénarios d'écoulement et de transport de solutés SB1 à SB3 ont été réalisés dans un milieu souterrain binaire. Il s'agit d'une représentation caractérisée par une proportion p de mailles à forte conductivité que l'on note $k+$ et une proportion $(1-p)$ de mailles à faible conductivité notée $k-$. Les milieux binaires sont capables de conserver la complexité des systèmes souterrains hétérogènes. L'idée consiste à tester le modèle intégré dans une configuration complexe marquée par une chenalisation accentuée de l'écoulement, qui ne passe quasi exclusivement que par les zones à forte conductivité. Une telle configuration permet donc d'accentuer l'effet « 3-D » par antagonisme avec la valeur moyenne en 2-D.

Les milieux binaires ont été largement étudiés en se basant sur des approches de milieu effectif auto-cohérent dans des contextes électrodynamiques ou élastiques (Maxwell, 1873 ; Landau et Lifshitz; 1960, Au-riault, 1983; Pozdniakov et Tsang, 2004) et pour des études de l'écoulement des eaux souterraines (Shvidler, 1985 ; Dagan, 1989) et du transport (Rubin, 1995; Dagan et Lessoff, 2001). Les résultats théoriques dans un milieu binaire restent toutefois assez limités.

Le champ binaire illustré en figure 3.2 est créé à partir du champ hétérogène aléatoire de la conductivité hydraulique, généré pour les scénarios précédents. Ensuite, cette distribution hétérogène est binarisée à l'aide d'une valeur seuil, en attribuant à chaque élément une valeur caractéristique à haute conductivité $k+$ ou à faible conductivité $k-$. On obtient ainsi deux zones d'hétérogénéité avec des valeurs de conductivité hydraulique aléatoirement contrastées, définies à partir de la valeur seuil de conductivité hydraulique à saturation fixée $k_t = 10^{-4} m.s^{-1}$.

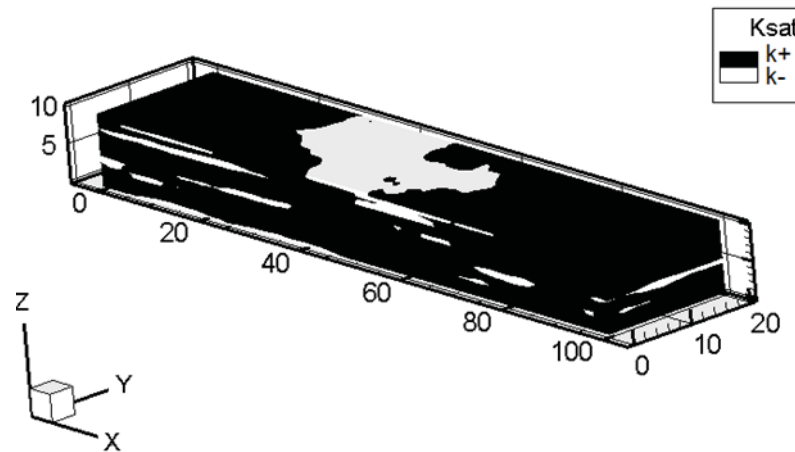


Figure 3.2 : Représentation du milieu binaire et du contraste entre les zones d'hétérogénéité $k+$ et $k-$

Tous les autres paramètres d'écoulement et de transport sont considérés comme uniformes dans l'espace. La porosité est définie telle que $\phi = 0.15$ et l'emmagasinement spécifique $S_s = 5 \times 10^{-3} m^{-1}$. Les paramètres de Van Genuchten sont fixés à $\alpha = 1 m^{-1}$ et $n = 2$. Concernant le problème de transport, le coefficient de dispersivité longitudinale est $\alpha_L = 5 m$,

les coefficients de dispersivité transversale horizontale et verticale (pour le 3-D) sont $\alpha_T = 0.5$ m, et le coefficient de diffusion moléculaire dans le milieu poreux est égal à $10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Dans NIHM, l'hétérogénéité verticale est représentée par les 28 couches d'épaisseurs différentes, en affectant à chaque couche la valeur correspondante du champ stochastique de conductivité hydraulique généré. En 2-D «écoulement», la valeur de la transmissivité équivalente est calculée en intégrant numériquement les valeurs sur ces 28 couches.

Des conditions aux limites de Dirichlet pour l'écoulement sont imposées sur les deux faces opposées (en $x = 0$ et $x = 100$ m), tandis que les autres faces (latérales normales à la direction y et au fond du domaine) sont considérées comme des limites de Neumann à flux nul. Les valeurs des charges imposées sont ajustées en fonction des situations hydrologiques ciblées par chaque scénario (entièrement saturée ou partiellement saturée) décrites dans les paragraphes qui suivent. A partir des propriétés mentionnées ci-dessus, différentes conditions (initiales et aux limites) pour les problèmes d'écoulement et de transport ont été définies pour chacun des scénarios S1 à S5 et SB1 à SB3 sous un régime d'écoulement transitoire (cf., tableau 3.1, tableau 3.2).

Tableau 3.1. Conditions d'écoulement et de transport de solutés dans un pavé régulier hétérogène

Scénario	S1	S2	S3	S4	S5
Sat: Système Saturé	Sat	Unsat	Unsat	Unsat	Unsat
Unsat: Système Non Saturé					
Modèle d'écoulement					
Charge initiale (m)	10	7	5	9	7
Intensité de la pluie (m.s⁻¹)	-	2×10^{-7}	2×10^{-7}	2×10^{-7}	2×10^{-7}
Durée de la pluie (jours)	-	5	5	5	5
Modèle de transport					
Concentration initiale (kg.m⁻³)	0	0	0	0	0
Masse injectée (kg.s⁻¹)	6×10^{-3}	6×10^{-3}	6×10^{-3}	6×10^{-3}	6×10^{-3}
Durée d'injection (jours)	3	3	3	3	3
Épaisseur de la zone d'injection (m)	10	10	10	0.1	0.1

Tableau 3.2. Conditions d'écoulement et de transport de solutés dans un milieu souterrain binaire

Scénario	SB1	SB2	SB3
-----------------	------------	------------	------------

Sat: Système Saturé	Unsat	Unsat	Unsat
Unsat: Système Non Saturé			
Valeur seuil de conductivité k_i (m.s⁻¹)	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}
Valeur à haute conductivité k_+ (m.s⁻¹)	5×10^{-3}	5×10^{-3}	5×10^{-3}
Valeur à faible conductivité k_- (m.s⁻¹)	5×10^{-5}	5×10^{-6}	5×10^{-5}
Modèle d'écoulement			
Charge initiale (m)	5	5	9
Intensité de la pluie (m.s⁻¹)	2×10^{-7}	2×10^{-7}	2×10^{-7}
Durée de la pluie (jours)	5	5	5
Modèle de transport			
Concentration initiale (kg.m⁻³)	0	0	0
Masse injectée (kg.s⁻¹)	6×10^{-3}	6×10^{-3}	6×10^{-3}
Durée d'injection (jours)	3	3	3
Épaisseur de la zone d'injection (m)	10	10	0.1

3.2.1.3. Les différents scénarios considérés

a- Injection du contaminant sur toute l'épaisseur de l'aquifère

Dans le premier scénario (S1), le domaine est totalement saturé, et de fait la nappe se comporte comme un système captif. La charge hydraulique initiale est fixée à 10 m, et des conditions de Dirichlet imposent des charges hydrauliques constantes de 12 m et 10 m en $x = 0$ m et $x = 100$ m, respectivement (Figure 3.3).

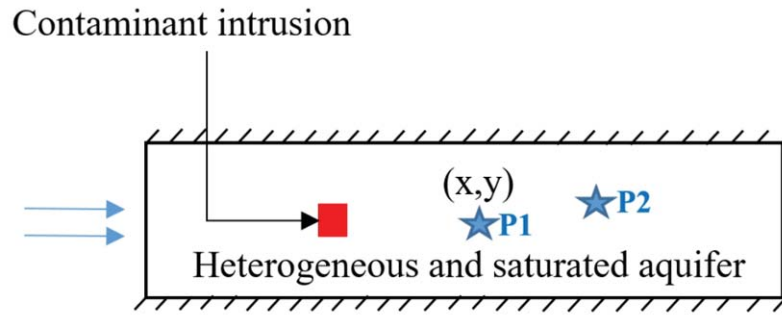


Figure 3.3 : Coupe horizontale des conditions aux limites pour le scénario saturé (S1). Les étoiles indiquent les emplacements utilisés pour comparer les courbes de restitution à partir des résultats de la simulation de transport.

Dans le second scénario (S2), le domaine est partiellement saturé avec une charge initiale située 3 m sous la surface du sol. Les conditions aux limites de Dirichlet en $x = 0$ m et $x = 100$ m sont fixées respectivement à $H1 = 8$ m et $H2 = 7$ m, comme le montre la figure 3.4. Une pluie uniforme d'intensité 2×10^{-7} m.s⁻¹ est appliquée à la surface du domaine pendant les 5 premiers jours. Le troisième scénario (S3) se rapproche du second cas test, hormis la charge initiale et les conditions aux limites de Dirichlet choisies dans S3 de telle sorte que l'épaisseur de la zone non saturée soit plus grande, afin d'évaluer l'effet de l'hypothèse de l'équilibre hydrostatique instantané sur la modélisation du transport. La charge hydraulique initiale est ainsi prise à 5 m et des conditions de Dirichlet imposent des charges hydrauliques constantes $H1 = 6$ m et $H2 = 5$ m en $x = 0$ m et $x = 100$ m, respectivement (Figure 3.4). En ce qui concerne le problème du transport, dans les trois configurations S1, S2 et S3, la concentration initiale est égale à 0, exceptée pour une colonne verticale traversant toute l'épaisseur de l'aquifère et qui couvre une section horizontale rectangulaire s'étendant sur $x = 26-32$ m et $y = 8-13$ m (Figure 3.3 et Figure 3.4). Sur cette région, l'injection du soluté est représentée par l'intermédiaire d'un terme source uniformément réparti sur les 10 mètres de profondeur du domaine. La masse injectée est égale à 6×10^{-3} kg.s⁻¹ pour une durée d'injection de 3 jours. Toutes les limites sont définies par un flux de dispersion nul. Concernant les cas tests en milieu souterrain binaire, les scénarios SB1 et SB2 reprennent les mêmes problèmes d'écoulement et de transport que ceux décrits pour le scénario S3. Dans le but d'évaluer l'impact des valeurs de k^+ et k^- sur les

performances du modèle NIHM-T, on teste deux champs binaires avec des contrastes différents de conductivité hydraulique dans SB1 et SB2 (cf., tableau 3.2).

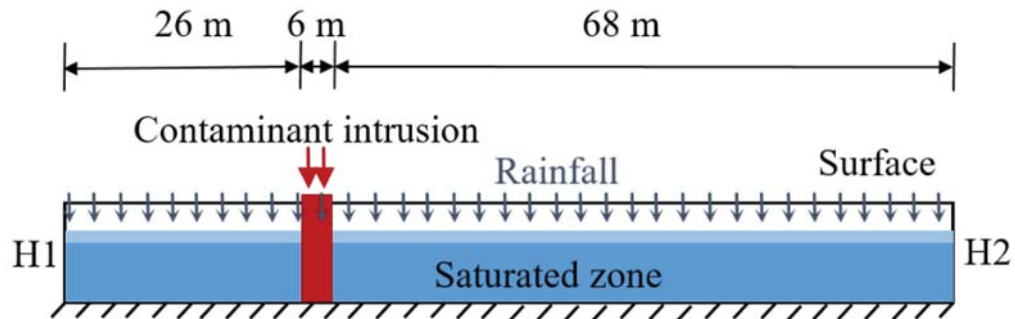


Figure 3.4 : Coupe transversale verticale du domaine avec les conditions aux limites (charges imposées H1 et H2) pour simuler l'écoulement non saturé et le transport de soluté - scénarios S2 et S3.

b- Injection du contaminant en surface

En pratique, les contaminants peuvent également atteindre les eaux souterraines à partir de la surface du sol. Des scénarios supplémentaires (S4 et S5), sont donc proposés, où, pour une modélisation 3-D, l'injection de contaminants se limite à une surface au sol, toujours située dans la section $x = 26 - 32$ m, $y = 8 - 13$ m, mais sur une épaisseur de 10 cm seulement à compter de la surface du domaine (cf. Figure 3.5). Une modélisation 2-D ne peut pas distinguer une injection limitée à quelques centimètre d'épaisseur et générera l'équivalent d'une injection sur toute la verticale du système. L'intérêt de la comparaison 3-D, 2-D est alors d'évaluer les erreurs commises, notamment lorsque le soluté injecté en surface est soumis aux effets d'infiltration (effets moins bien vus si l'injection se fait sur toute la colonne). Le problème d'écoulement dans les scénarios S4 et S5 est très similaire à celui du scénario S2, sauf pour S4, dont on réduit l'épaisseur de la zone non saturée en posant une charge hydraulique initiale à 9 m et des charges constantes $H1 = 10$ m et $H2 = 9$ m en $x = 0$ m et $x = 100$ m, respectivement (voir Figure 3.5). La période de simulation de l'écoulement et du transport est de 16 jours avec un pas de temps maximal de 1 h. Le scénario SB3 reprend les configurations d'écoulement et de transport du scénario S5 avec une injection similaire du contaminant en surface.

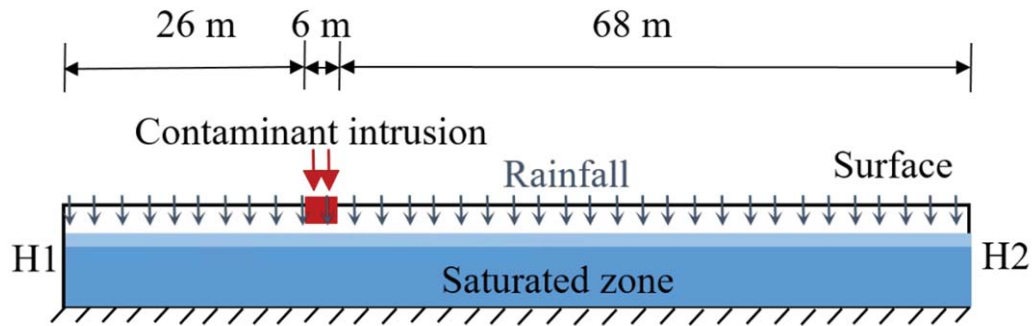


Figure 3.5 : Coupe transversale verticale du domaine avec les conditions aux limites (charges imposées H1 et H2) pour simuler l'écoulement non saturé et le transport de soluté - scénarios S4 et S5.

3.2.2. Cas test du convergent hétérogène à fond bosselé et incliné

3.2.2.1. Géométrie et maillage

Le scénario S6 est conçu pour évaluer la qualité de l'approche de modélisation dans une configuration géométrique plus complexe avec un fond incliné et bosselé, et des conditions hydrologiques plus variables. Il s'agit d'un bassin convergent formé de deux versants triangulaires reliés à un chenal de 140 m de long et 6 m de large (Figure 3.6). Les pentes dans les directions x et y sont respectivement égales à 0.05 et 0.02. L'élévation du substratum est d'abord définie en le supposant parallèle à la surface avec une épaisseur du domaine souterrain fixée à 20 m. Ensuite, l'élévation du fond pour chaque nœud de calcul est modifiée par rapport à son niveau initial via une perturbation aléatoire de distribution uniforme de +/- 1 m non corrélée dans l'espace. L'ensemble produit un substratum chaotique complètement aléatoire.

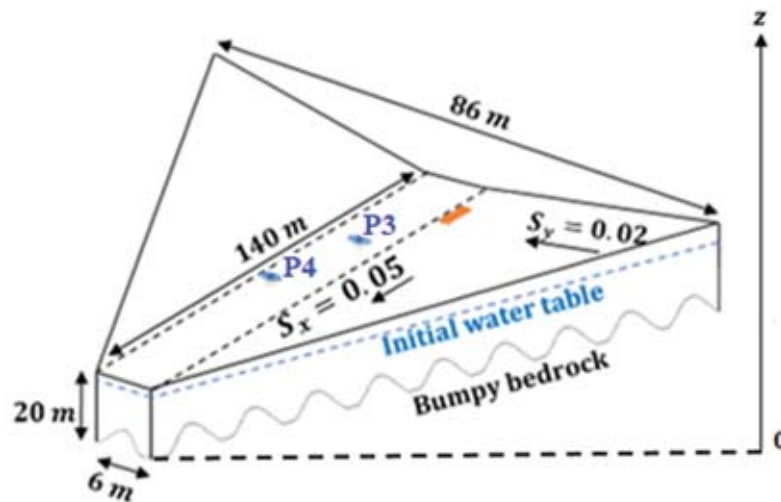


Figure 3.6 : Configuration géométrique du domaine convergent irrégulier

Dans le modèle TRACES 3-D, le maillage du domaine est composé de 123 368 éléments hexaédriques de taille uniforme (2 m) dans les directions x et y . Le domaine est discrétisé en 45 couches d'épaisseur croissante le long de la direction verticale z . Le maillage est raffiné près de la surface avec des couches plus fines d'épaisseur allant de 1 cm jusqu'à 5 cm. Les paramètres équivalents intégrés du modèle à dimension réduite sont calculés en utilisant une discrétisation spatiale similaire. Le maillage du modèle NIHM-T est composé de 3 220 éléments triangulaires générés comme précédemment mentionné en divisant en deux les faces horizontales de la couche supérieure du maillage 3-D.

3.2.2.2. Champ de conductivité hydraulique

Le champ de conductivité hydraulique à saturation est généré à partir de la même technique que celle utilisée pour le scénario S1, en obéissant à une fonction de covariance sphérique anisotrope de longueur de corrélation 60 m dans la direction horizontale et 15 m dans la direction verticale. La distribution statistique résultante du \log_{10} des valeurs de conductivité est gaussienne, de moyenne -4.56 et s'étend sur une plage de [-6.25, -2.95]. Le champ de conductivité hétérogène a d'abord été généré dans un parallélépipède - comme le montre la figure 3.7 - puis interpolé « au plus proche voisin » sur les maillages utilisés à la fois pour

NIHM-T et TRACES 3-D. Les paramètres de Van Genuchten α et n sont fixés à 1 m^{-1} et 2, respectivement.

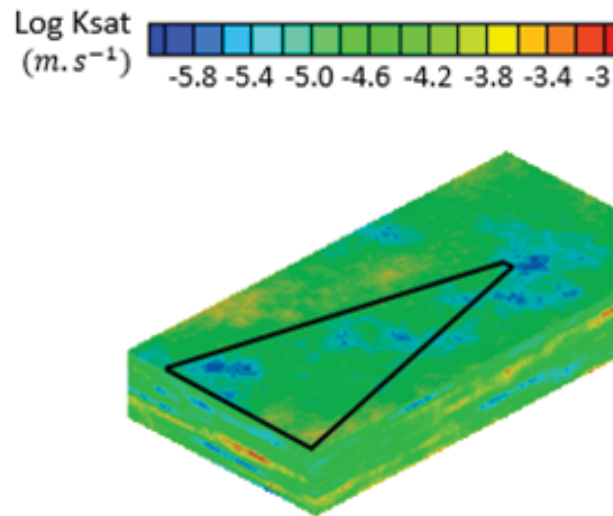


Figure 3.7 : Champ de conductivité hydraulique à saturation dans le compartiment souterrain associé au domaine convergent irrégulier (le triangle noir comme trace en surface du domaine)

3.2.2.3. Conditions aux limites et initiales

Des charges hydrauliques de 24.8 m et 19 m sont respectivement imposées aux limites amont et aval du domaine. Les conditions initiales d'écoulement sont définies à l'aide d'une interpolation linéaire entre les conditions aux limites amont et aval. La période de simulation est de 800 jours. Une précipitation uniforme d'intensité $2 \times 10^{-7} \text{ m.s}^{-1}$ est appliquée à la surface du domaine pendant 20 jours tous les 60 jours, entraînant ainsi des régimes d'écoulement transitoires sur toute la période de simulation.

Pour le problème de transport de soluté, un terme source de $1.6 \times 10^{-4} \text{ kg.s}^{-1}$ est imposé sur les mailles comme terme puits/source pendant 300 jours sur les mailles situées en surface dans la zone $x = 10 - 20 \text{ m}$, $y = 46 - 50 \text{ m}$, et présentées en orange sur la figure 3.6. Le coefficient de dispersivité longitudinale est pris égal à $\alpha_L = 5 \text{ m}$, les coefficients de dispersivité transversale horizontale et verticale (pour le 3-D) sont égaux à $\alpha_T = 0.5 \text{ m}$, et le coefficient de diffusion moléculaire est égal à $10^{-9} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ (cf., tableau 3.3). Les évolutions dans le temps des

concentrations moyennes et des moments statistiques sont comparées entre NIHM-T et TRACES -3D aux points P3 et P4, reportés en figure 3.6.

Tableau 3.3. Conditions d'écoulement et de transport de solutés dans un convergent hétérogène à fond bosselé et incliné

Scénario	S6
Sat: Système Saturé	Unsat
Unsat: Système Non Saturé	
Modèle d'écoulement	
Charge initiale (m)	19 - 24.8
Intensité de la pluie (m.s⁻¹)	2×10^{-7}
Durée de la pluie (jours)	20 ($\times 12$)
Modèle de transport	
Concentration initiale (kg.m⁻³)	0
Masse injectée (kg.s⁻¹)	1.6×10^{-4}
Durée d'injection (jours)	300
Épaisseur de la zone d'injection (m)	0.1

3.3. Résultats et discussion

La Figure 3.8 montre l'évolution dans le temps des concentrations moyennes (BTC) dans le premier scénario S1 (i.e. ; dans des conditions d'écoulement complètement saturé) en deux points sélectionnés P1 ($x = 50$ m, $y = 10$ m) et P2 ($x = 70$ m, $y = 13$ m) reportés sur la figure 3.3. L'évolution temporelle des moments spatiaux pour le scénario S1 est représentée sur les figures 3.8 et 3.9. Les résultats produits par l'approche à dimension réduite et par le modèle complet TRACES 3-D sont très proches, avec une erreur quadratique moyenne maximale (RMSE) de seulement 5.56×10^{-3} kg.m⁻³ pour les concentrations moyennes. Les BTCs et l'évolution des moments d'ordre zéro, d'ordre un et d'ordre deux démontrent que dans un milieu saturé, le modèle à dimension réduite est capable de reproduire avec précision la distribution des temps d'arrivée de concentrations et l'évolution spatiale du panache dans un champ de conductivité hydraulique hétérogène. Il s'agit d'un cas particulier où la technique d'intégration

sur la direction perpendiculaire au substratum permet de décrire de façon fiable, à la fois l'écoulement et le transport dans des milieux poreux hétérogènes.

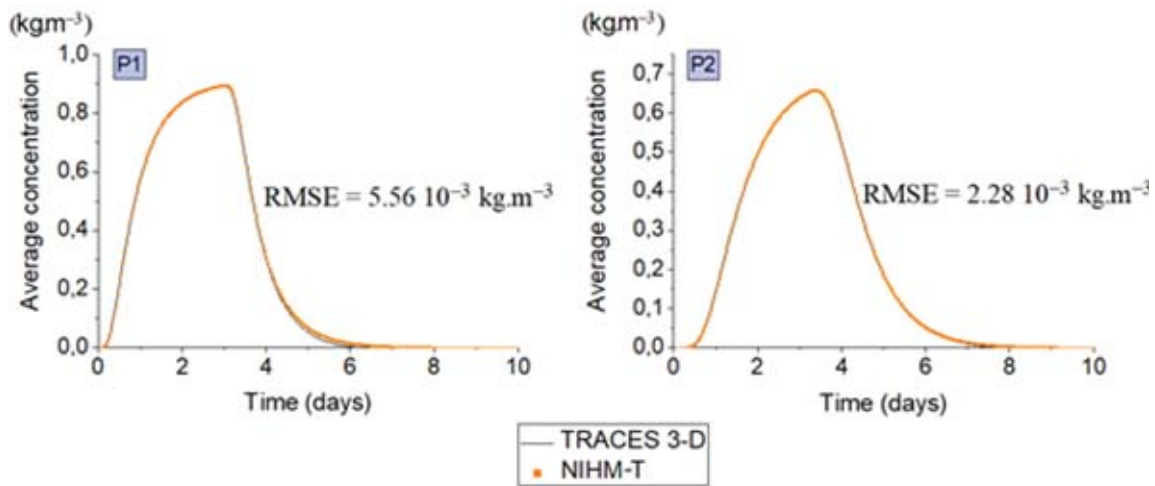


Figure 3.8 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario S1.

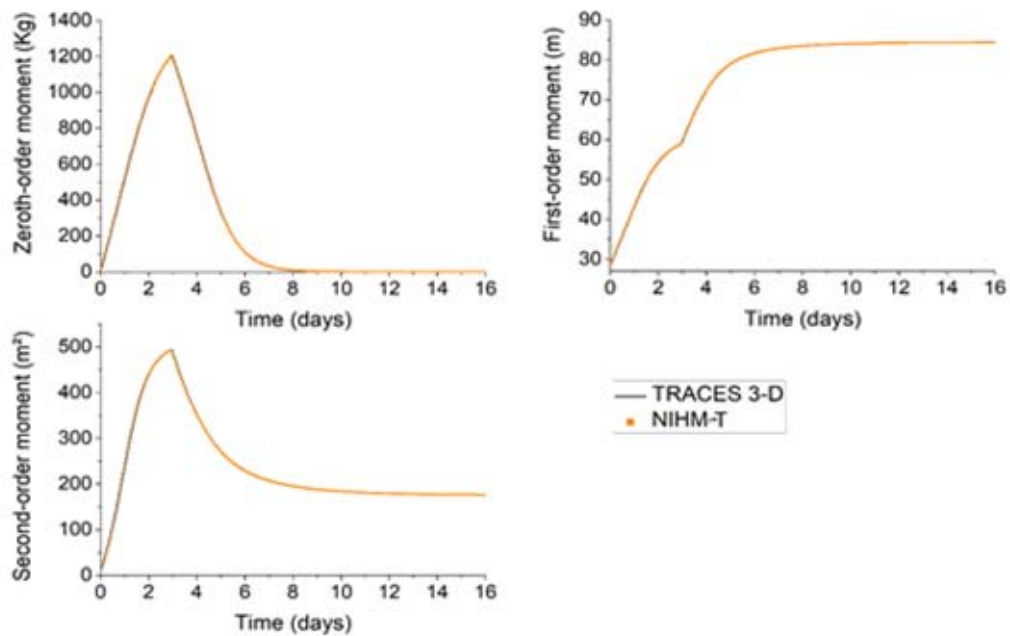


Figure 3.9 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario S1.

Les paires (Figure 3.10, Figure 3.11), (Figure 3.12, Figure 3.13), (Figure 3.14, Figure 3.15) et (Figure 3.16, Figure 3.17) affichent les évolutions des mêmes items, c'est-à-dire les BTCs en P1 et P2, et les moments spatiaux, pour les scénarios S2, S3, SB1 et SB2, respectivement. Dans les deux cas tests S2 et S3, les allures des BTCs sont similaires mais on constate une valeur maximale des concentrations plus élevée dans le modèle NIHM-T et une RMSE maximale de $8.21 \times 10^{-2} \text{ kg.m}^{-3}$ pour les concentrations moyennes lorsque l'épaisseur de la zone vadose est la plus élevée (S3, Figure 3.12). Les moments d'ordre zéro montrent que les panaches de soluté atteignent la limite aval après 3 jours, indépendamment de la simulation S2, S3, SB1 ou SB2 et des approches 2-D versus 3-D. Les moments d'ordre un sont proches aux temps courts de la simulation et deviennent plus élevés pour le modèle NIHM-T. Ce constat s'explique par le fait que TRACES 3-D adopte une représentation explicite de la zone non saturée et reproduit davantage le piégeage de la masse de soluté dans les zones à faible vitesse du compartiment souterrain peu profond. La position moyenne du panache change un peu plus rapidement dans les simulations de NIHM-T et avance aussi légèrement plus loin en aval que dans les simulations 3-D. Toujours en raison de l'éventuel piégeage du soluté dans la zone non saturée dans le modèle 3-D, les moments d'ordre deux, justement associés à l'étalement de la concentration dans l'espace, sont légèrement plus élevés dans le modèle complet.

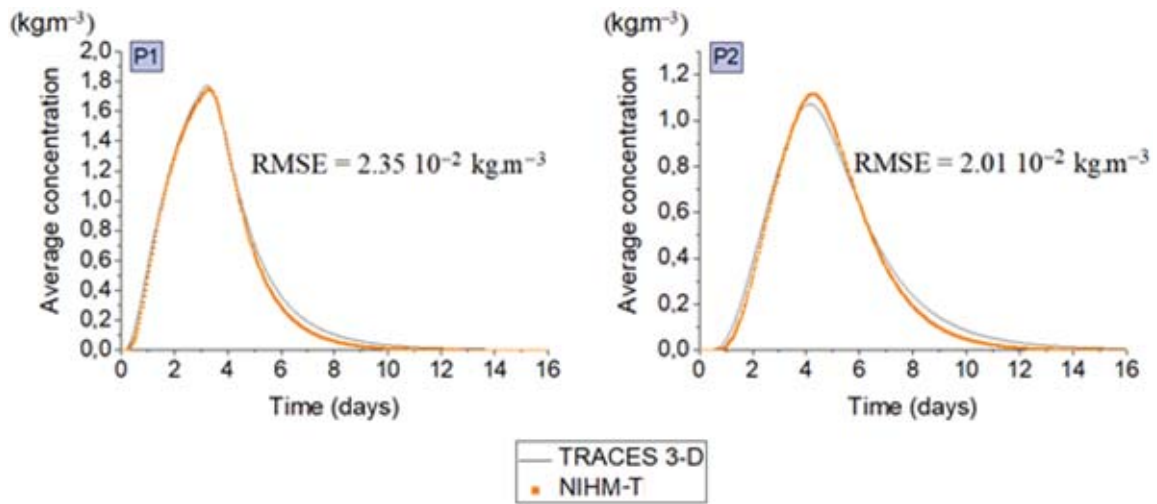


Figure 3.10 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario S2.

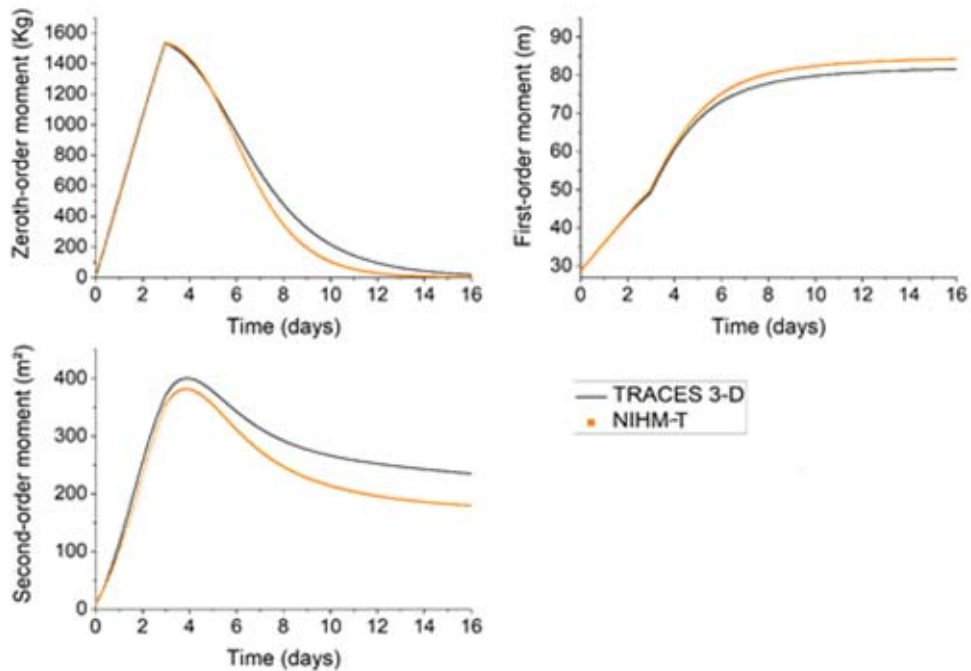


Figure 3.11 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario S2.

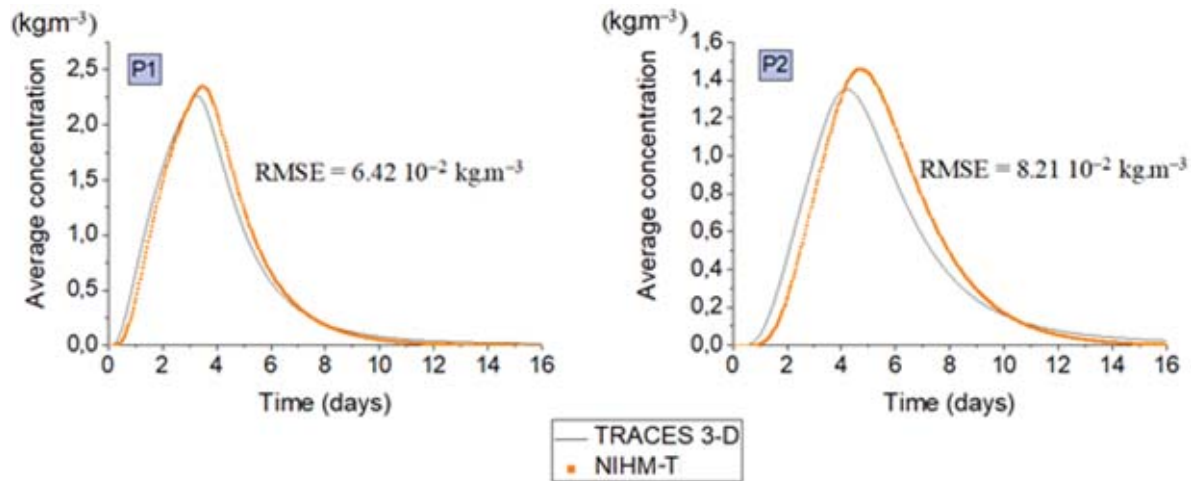


Figure 3.12 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario S3.

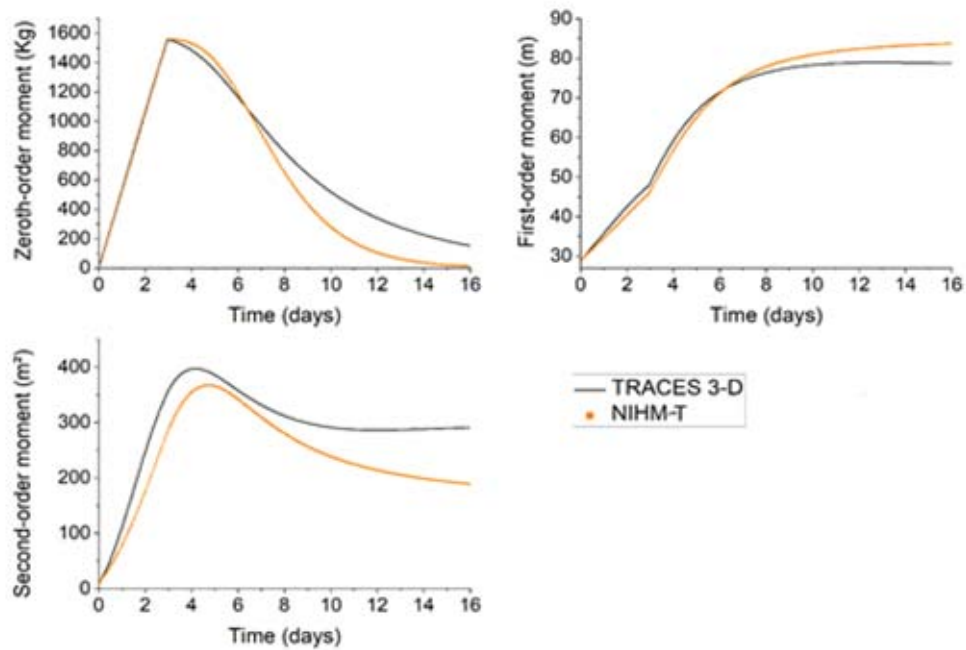


Figure 3.13 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario S3.

Les écarts entre les résultats des deux modèles augmentent avec l'épaisseur de la zone non saturée (en comparant Figure 3.10 avec Figure 3.12, et Figure 3.11 avec Figure 3.13) et pourraient être dus aux simplifications fondatrices du modèle réduit. En effet, les vitesses intégrées le long de la direction z ne coïncident pas exactement avec celles reproduites par le modèle 3-D. Les processus d'écoulement verticaux qui produisent la recharge sont inclus dans le modèle TRACES 3-D. Mais, ils ne sont que partiellement rendus dans NIHM, puisque l'infiltration n'est vue que comme une variation des charges hydrauliques à saturation et des teneurs en eau en zone non saturée. La confirmation est donnée par les figures 3.18 et 3.19. Les allures du panache de soluté 2-D pour les scénarios S2 et S3 sont très similaires, or les coupes transversales 3-D indiquent clairement qu'une zone vadose plus épaisse piège davantage de masse de soluté sous la surface. Comme mentionné auparavant, dans les simulations complètes 3-D, le soluté reste piégé dans la zone non saturée, là où les vitesses sont faibles comparées à celles dans la zone saturée. Ce phénomène de piégeage diminue les pics de concentration, réduit la vitesse moyenne de déplacement du soluté et augmente la dispersion du contaminant dans

les configurations 3-D. En comparant les résultats des scénarios SB1 et SB2, on constate que les écarts entre les simulations 2-D intégré et 3-D augmentent avec le contraste entre k^+ et k^- . Dans SB1, le contraste entre les zones d'hétérogénéité est d'environ deux ordres de grandeur, contre trois ordres de grandeur dans SB2. Les BTCs et l'évolution des moments d'ordre zéro, d'ordre un et d'ordre deux dans SB1 sont correctement reproduits dans le modèle NIHM-T, or les quelques écarts relevés dans SB2 proviennent d'une augmentation de la chenalisation 3-D des écoulements quand on augmente le contraste entre k^+ et k^- . A cela s'ajoute aussi le piégeage 3-D en zone vadose, non pris en compte explicitement par l'intégration 2-D.

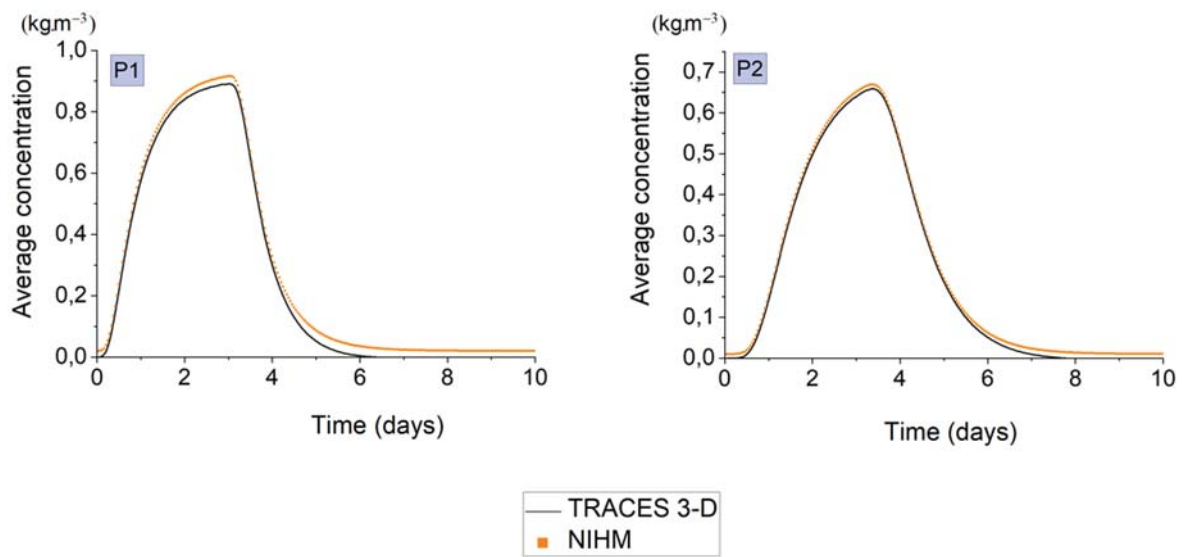


Figure 3.14 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario SB1.

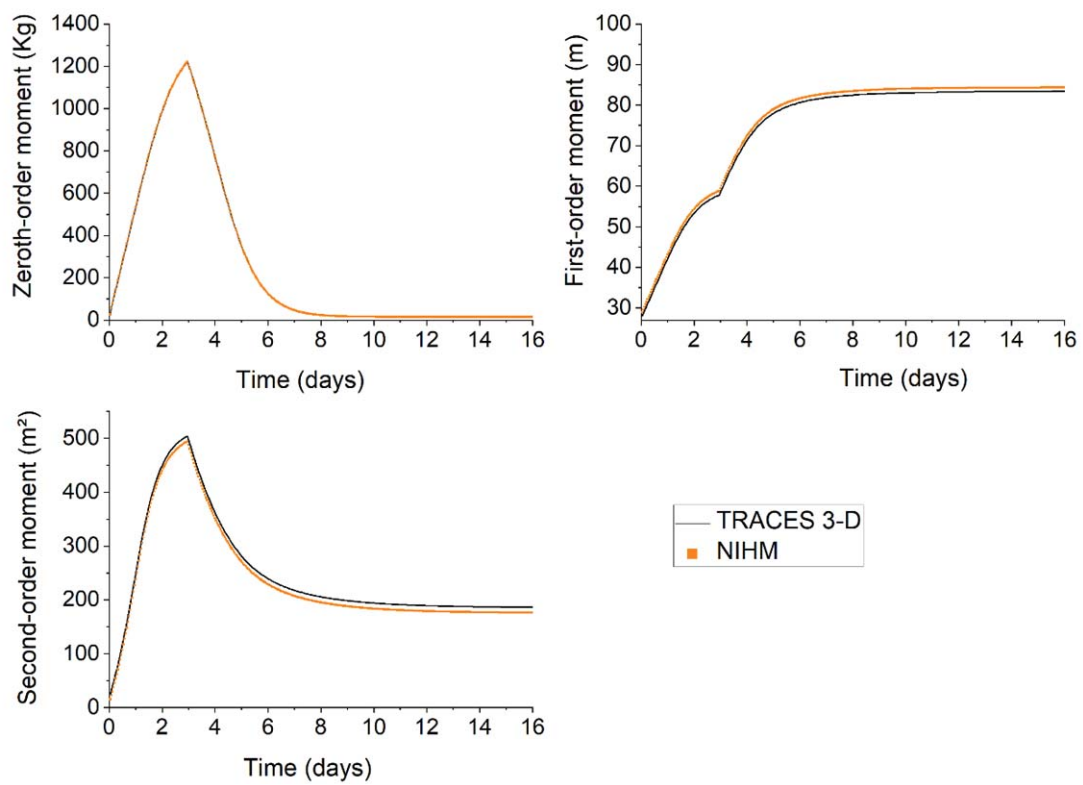


Figure 3.15 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario SBI.

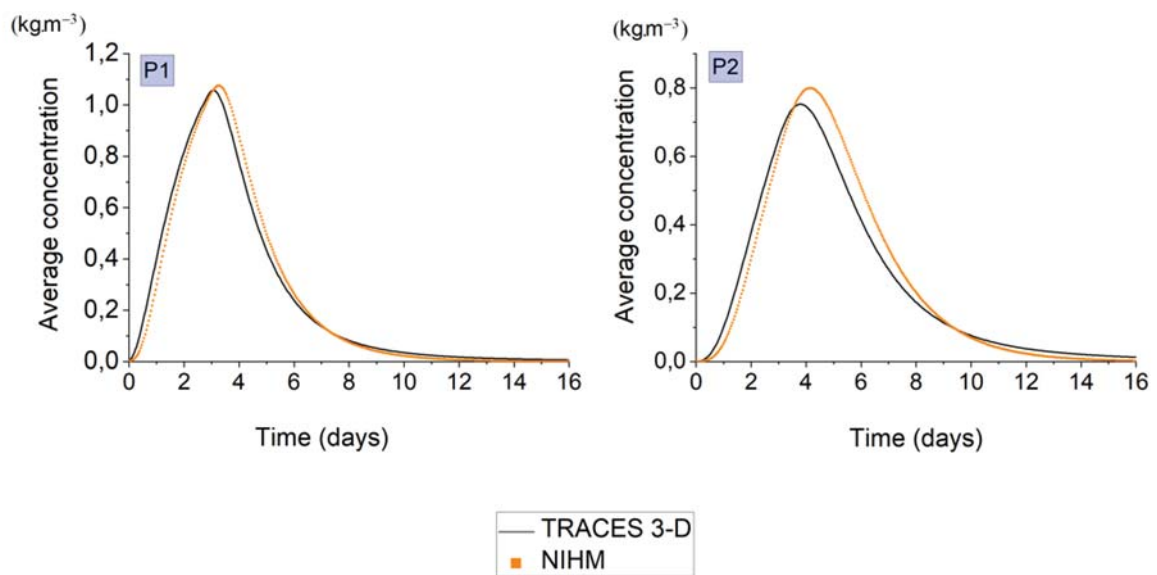


Figure 3.16 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario SB2.

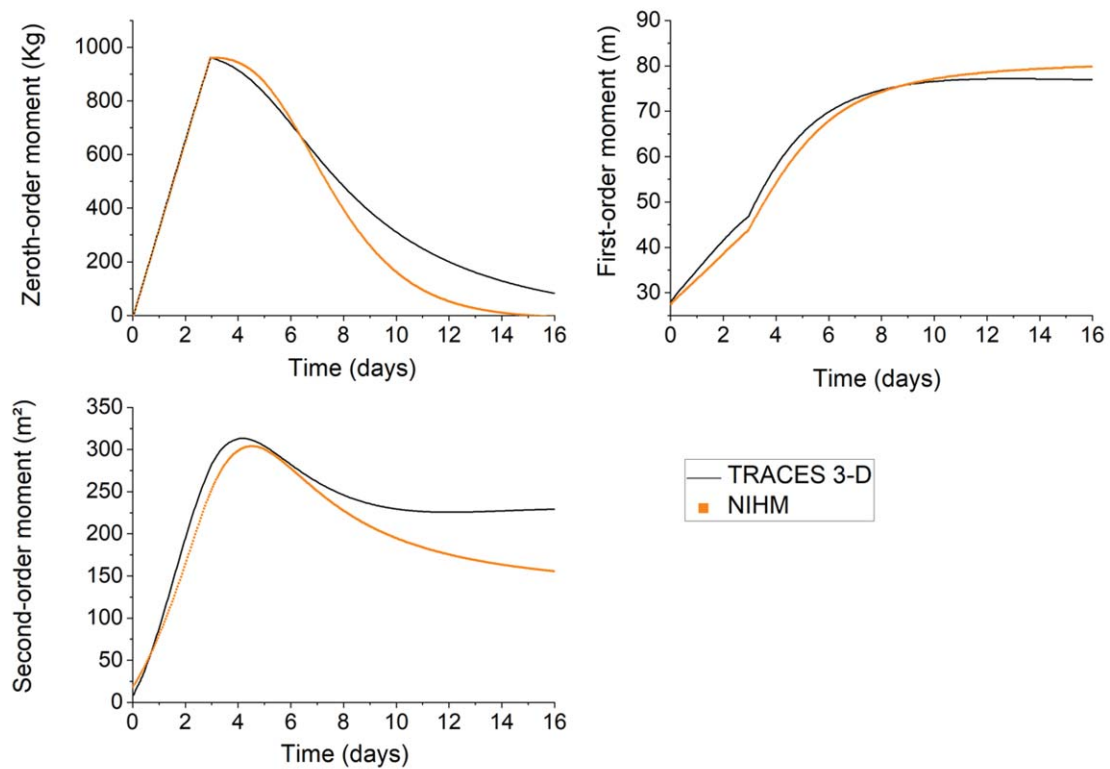


Figure 3.17 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario SB2.

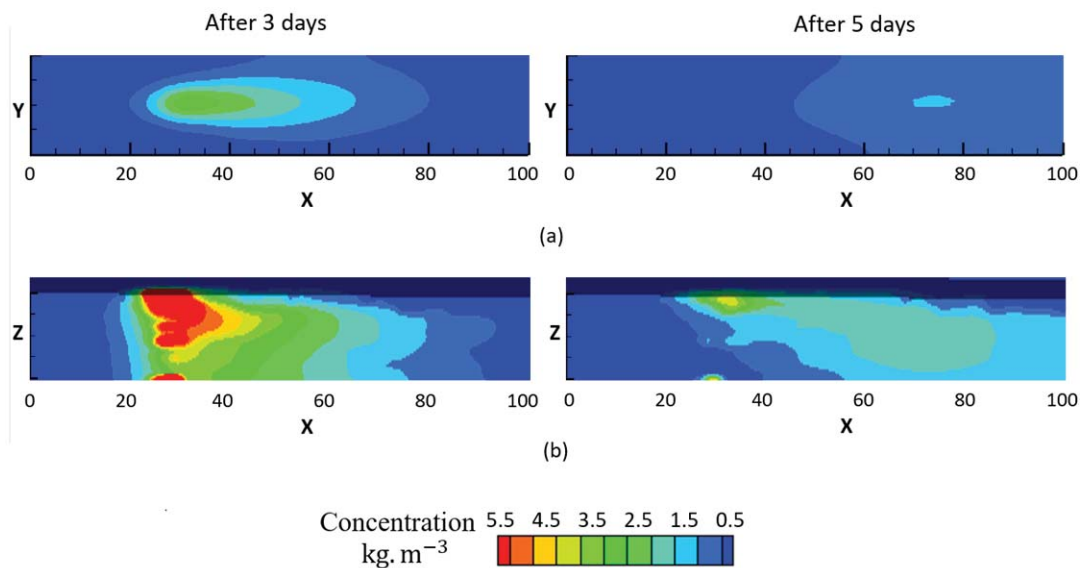


Figure 3.18 : (a)-Vues horizontales du panache de soluté 2-D simulé par le modèle NIHM-T. (b)- Coupes transversales verticales à travers le panache de soluté 3-D simulé par le modèle complet TRACES 3-D – scénario S2.

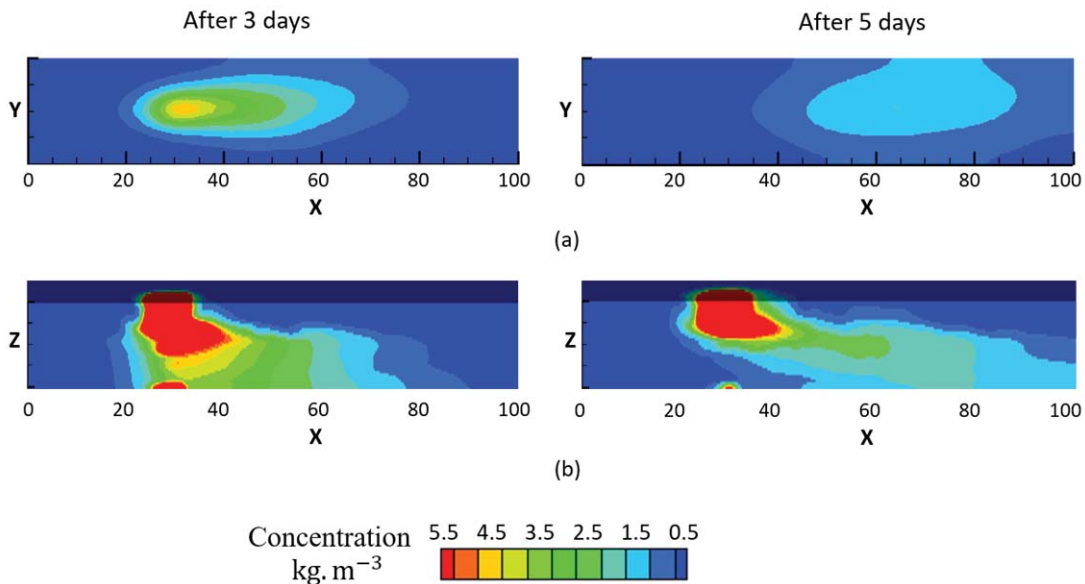


Figure 3.19 : (a)-Vues horizontales du panache de soluté 2-D simulé par le modèle NIHM-T. (b)- Coupes transversales verticales à travers le panache de soluté 3-D simulé par le modèle complet TRACES 3-D – scénario S3.

Lorsque le soluté est injecté seulement en surface (pour un modèle 3-D, scénarios S4, S5 et SB3), NIHM-T peut sous-estimer l'accumulation des contaminants, initialement stockés dans la zone non saturée de l'approche 3-D. Dans le scénario S4, où la zone vadose est mince (environ un mètre sur l'ensemble du système), les résultats de la figure 3.20 et de la figure 3.21 indiquent sans conteste que le modèle à dimension réduite reproduit correctement les résultats du modèle 3-D, avec une RMSE maximale de $5.51 \cdot 10^{-2} \text{ kg.m}^{-3}$ pour les concentrations moyennes (Figure 3.20). Dans le scénario SB3, la zone vadose est également mince d'environ un mètre et les résultats illustrés dans la figure 3.22 et la figure 3.23 montrent que les deux modèles sont en bon accord, avec un étalement de la concentration légèrement plus important dans le modèle 3-D complet. L'éventuelle chenalisation des écoulements d'un milieu binaire paraît quasi sans effet comparé à la description simplifiée de la zone vadose.

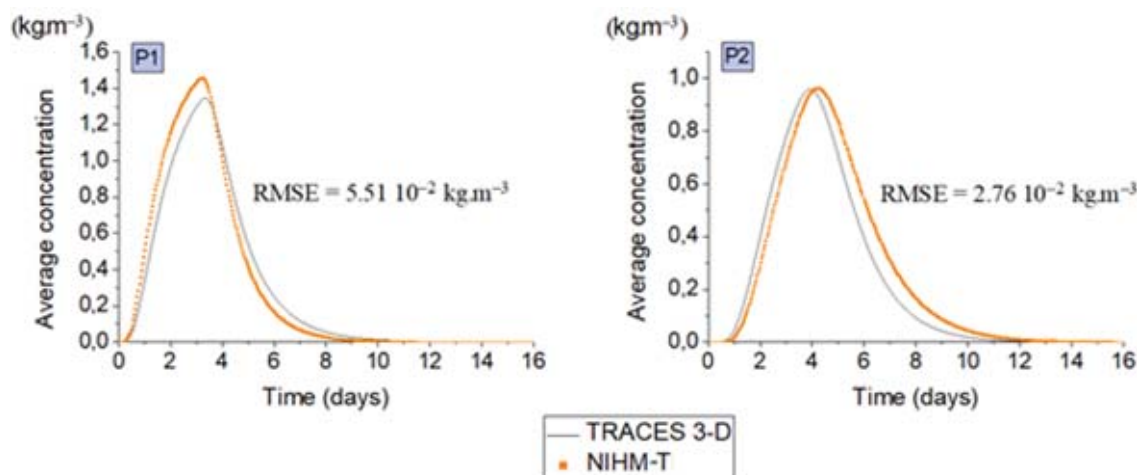


Figure 3.20 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario S4.

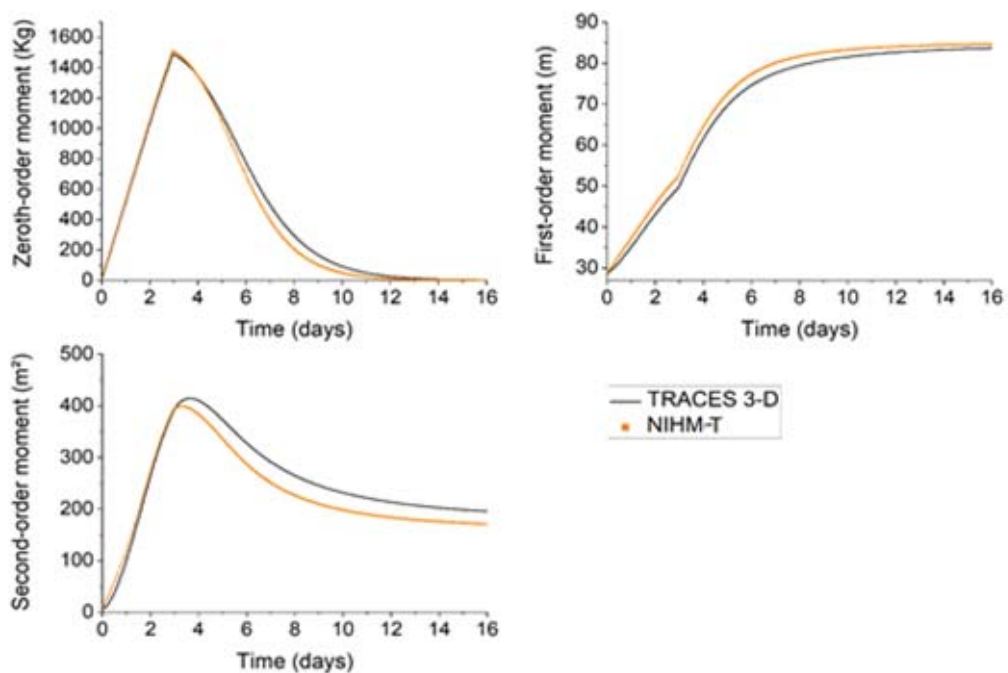


Figure 3.21 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario S4.

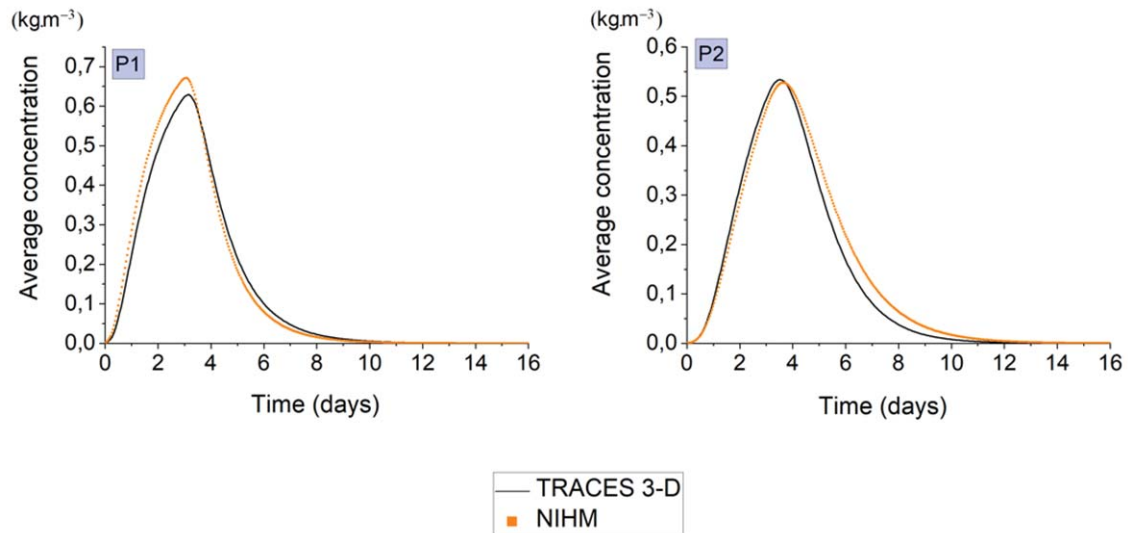


Figure 3.22 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario SB3.

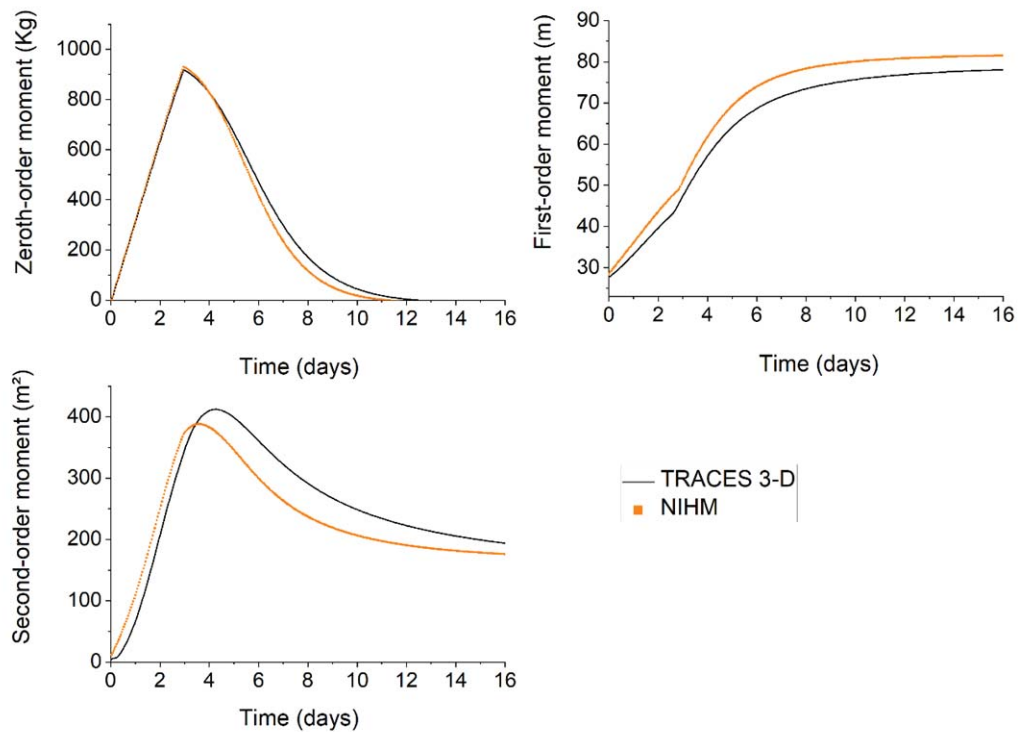


Figure 3.23 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario SB3.

Lorsque la zone non saturée est plus épaisse (scénario S5), l'effet « rétention de soluté » en zone vadose sur le transport est amplifié par rapport aux scénarios où l'injection du soluté se fait sur toute l'épaisseur du domaine. Le soluté, initialement concentré uniquement dans la partie supérieure de la zone non saturée, reste piégé dans les zones de faibles vitesses et seule une partie de la masse du soluté atteint les vitesses plus élevées de la zone saturée en dessous. Par conséquent, le transport de soluté simulé 3-D est globalement retardé, entraînant des pics de concentration plus faibles (Figures 3.24 et 3.25) et un étalement plus important (Figure 3.25). C'est ce que confirme l'évolution des moments d'ordre zéro, montrant une diminution plus rapide de la masse du soluté à partir du troisième jour dans le modèle NIHM-T.

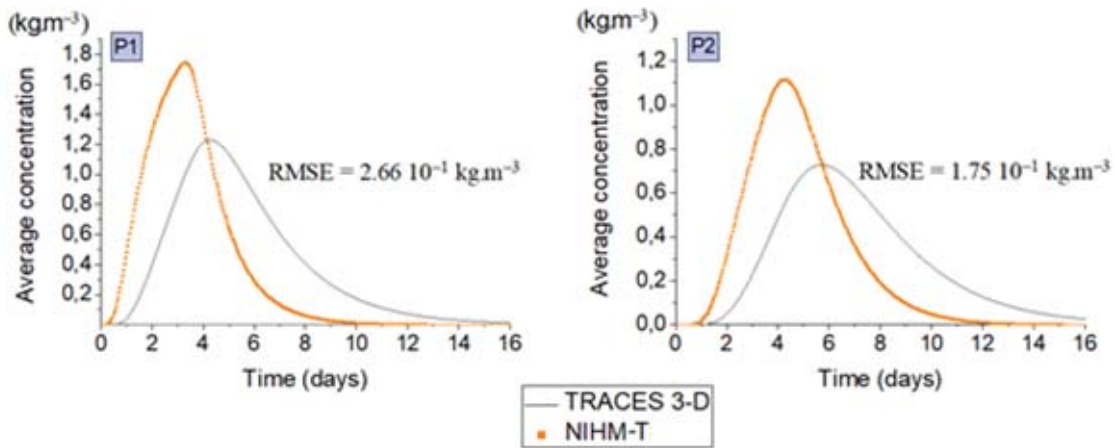


Figure 3.24 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario S5.

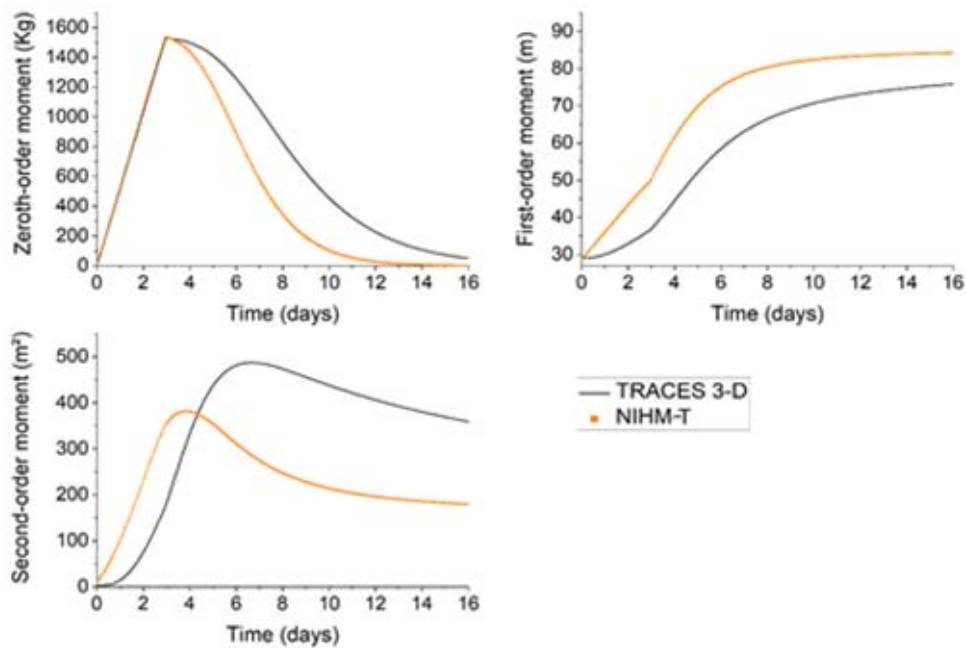


Figure 3.25 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario S5.

Les résultats présentés dans les Figures 3.26 et 3.27 pour le scénario S6 (dont les conditions géométriques et hydrologiques sont plus complexes) montrent la même tendance globale des évolutions de la concentration moyenne et des moments spatiaux de la

concentration. Comme la zone non saturée est plus épaisse au point P3 qu'au point P4 (en raison des conditions initiales), l'écart entre les concentrations moyennes produites par NIHM-T et TRACES 3-D est plus prononcé au point P3. Aux deux emplacements, le modèle 2-D NIHM-T affiche une bonne performance et une capacité à capturer correctement les dynamiques du transport de solutés. L'évolution dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux représentée en figure 3.27 montre également que NIHM-T est apte à simuler l'évolution spatiale du panache, quand bien même la géométrie du domaine et la configuration des problèmes d'écoulement et de transport soient plus complexes.

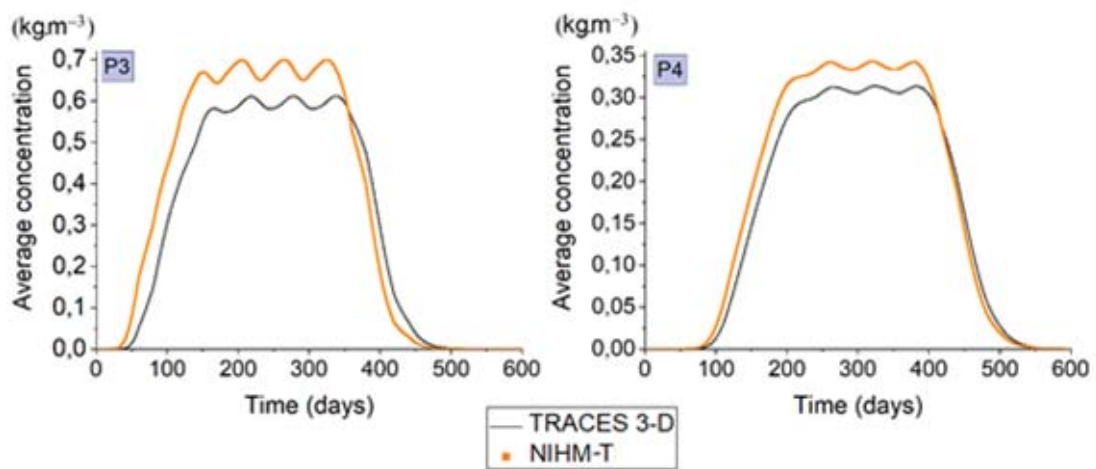


Figure 3.26 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations moyennes (BTC) aux emplacements P1 et P2 - scénario S6.

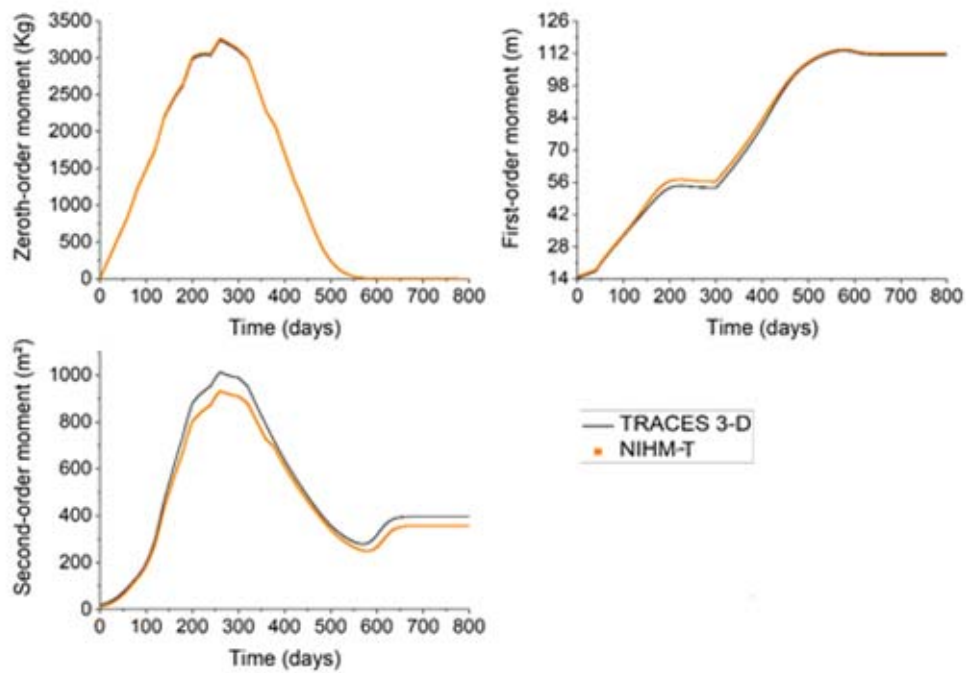


Figure 3.27 : Comparaison des évolutions dans le temps des moments d'ordre zéro, un et deux - scénario S6.

En ce qui concerne le coût de calcul, les temps CPU sont enregistrés et comparés pour chaque simulation. Les calculs pour les deux modèles NIHM-T et TRACES 3-D sont exécutés sur un ordinateur de bureau classique. Le temps de calcul est également lié à la période de simulation (Scénarios S1 à S5 et scénarios SB1 à SB3 : 16 jours ; scénario S6 : 800 jours). Le gain en temps de calcul est remarquable lorsqu'on reproduit l'écoulement et le transport de soluté en subsurface à l'aide du modèle NIHM-T. Le tableau 3.4 répertorie les temps CPU en distinguant notamment les résolutions de l'écoulement et de transport. Comme prévu, l'approche à dimension réduite diminue considérablement les temps CPU. Le facteur gain de temps entre résolution 3-D et 2-D, pour une résolution cumulée écoulement + transport, varie de 30 à 80 en fonction du scénario analysé. Ceci est lié principalement au nombre d'inconnues (Scénarios S1 à S5 et scénarios SB1 à SB3 : 12 240 en 2-D et 346 720 en 3-D ; Scénario S6 : 9 886 en 2-D et 768 912 en 3-D) et au caractère non linéaire de l'équation d'écoulement dans la zone non saturée.

Tableau 3.4. Comparaison des valeurs du temps CPU en minutes enregistrées pour les simulations d'écoulement et de transport de soluté.

	3-D flow	3-D transport	3-D full model	2-D integrated flow	2-D integrated transport	2-D integrated full model	CPU ratio (3-D/2-D)
S1	131.43	154.93	286.36	5.28	1.12	6.40	44.74
S2	98.22	171.96	270.18	6.92	1.06	7.98	33.86
S3	93.93	175.06	268.99	5.53	0.98	6.51	41.32
S4	104.75	178.76	283.51	4.97	0.94	5.91	47.97
S5	98.03	171.75	269.78	6.92	1.06	7.98	33.81
SB1	84.46	169.03	253.49	5.15	0.86	6.01	42.18
SB2	89.09	172.34	261.43	5.37	0.89	6.26	41.76
SB3	98.57	167.20	265.77	4.78	0.90	5.68	46.79
S6	5224.79	5405.98	10630.77	70.88	53.94	124.82	85.17

3.4. Bilan

Le compartiment souterrain du modèle réduit NIHM-T a été testé sur différents scénarios synthétiques d'écoulement et transport en milieux hétérogènes et binaires, et a été comparé à une approche 3-D complète. Les résultats indiquent que le modèle NIHM-T offre de bonnes performances lorsque le milieu est saturé, même dans des systèmes hétérogènes. Appliqué à des aquifères partiellement saturés, la présence d'une zone non saturée peut ajouter une complexité supplémentaire en raison des composantes tridimensionnelles non négligeables des flux d'eau et de leurs variations dans le temps et dans l'espace en subsurface. Le modèle à dimension réduite néglige les composantes verticales de l'écoulement sous l'hypothèse de l'équilibre hydrostatique. Les champs de vitesse moyenne résultants peuvent alors manquer de degré de résolution, ou simplement renvoyer des valeurs qui ne sont pas significatives des vitesses effectives de la zone non-saturée (pas de composante verticale visible, et également

erreurs sur les teneurs en eau, donc les conductivités effectives, quand le profil de pression capillaire n'est pas hydrostatique). L'impact principal sur la modélisation du transfert de solutés résulte de l'épaisseur relative de la zone non saturée comparée à celle de la zone saturée. En effet, dans le modèle NIHM-T, la reproduction des champs de vitesses 2-D moyennés sur la direction normale au substratum risque de passer à côté de la variabilité des conductivités hydrauliques due à des niveaux de saturation variables. Le fait est d'autant présent que l'on générera des écoulements assez fortement transitoires dans la zone vadose en raison de la variabilité des infiltrations par la surface. Par ailleurs, la binarisation du milieu et une éventuelle augmentation de la chenalisation des écoulements seraient quasi sans effet lorsque le contraste entre les zones d'hétérogénéité est de deux à trois ordres de grandeur, comparé à la description simplifiée de la zone vadose.

Les configurations 3-D avec des injections de solutés uniformément réparties sur toute l'épaisseur du système sont correctement reproduites par le modèle NIHM-T, puisqu'une injection en 2-D dans NIHM-T équivaut à une injection uniforme sur la profondeur en 3-D. Pour les scénarios où l'injection est limitée aux premières couches supérieures du domaine, les calculs 3-D dépendent des conditions d'injection variables sur la profondeur selon les mécanismes d'infiltration et les composantes verticales d'écoulement. Pour sa part, l'approche à dimension réduite considère toujours que la concentration injectée est uniformément répartie sur toute la profondeur. Les résultats de simulation de tels scénarios révèlent que les approximations associées à l'intégration du problème d'écoulement dans NIHM-T accentuent les écarts entre 2-D et 3-D. Cela est d'autant plus vrai que l'épaisseur de la zone non saturée augmente, et que l'infiltration et les composantes verticales d'écoulement variables dans le temps représentent les principales caractéristiques du système hydrologique.

Cependant, et malgré ses hypothèses de base et ses quelques défauts, le modèle NIHM-T s'avère pertinent pour simuler le transport de solutés dans les milieux poreux pour les aquifères peu profonds. En complément d'une simplification de la modélisation du transfert de masse en subsurface, il convient de mentionner que le temps CPU requis pour le modèle réduit est nettement inférieur à celui d'un calcul 3-D complet. Maintenant que l'approche à dimension réduite a été évaluée pour le transport de solutés en subsurface, le Chapitre 4 traite l'évaluation du modèle NIHM-T couplé surface-subsurface au travers des cas tests synthétiques.

Chapitre 4 : Modèle couplé à dimension réduite

NIHM-T

Le chapitre précédent a permis de valider le modèle de transport NIHM-T dans les milieux saturés et non saturés en subsurface. Ce chapitre a pour objectif d'évaluer le modèle de transport NIHM-T développé dans le cadre de ce projet de thèse dans sa version la plus aboutie impliquant des processus couplés surface-subsurface, présentée en détails au Chapitre 2 , puis de l'appliquer sur un cas réel. Il s'agit d'évaluer sa pertinence et son potentiel à représenter correctement la dynamique de transfert de solutés. La méthodologie d'évaluation du modèle couplé change un peu de celle utilisée pour évaluer la partie subsurface du modèle, détaillée au Chapitre 3 . Dans un premier temps, un cas test synthétique est utilisé pour qualifier l'approche de couplage en comparant les résultats à un modèle de référence : CATHY (CATchment HYdrology – Camporese et al, 2010). Dans un second temps, le modèle NIHM-T est appliqué à un cas réel : l'île du Rohrschollen, un hydrosystème de type ile fluviale située sur le Rhin et récemment restaurée.

4.1. Evaluation du modèle couplé à dimension réduite NIHM-T

Cette partie évalue le modèle de transport NIHM-T couplé surface-subsurface à partir d'un cas test synthétique. En général, la validation des modèles intégrés n'est pas une tâche simple, puisque les scénarios dans lesquels des interactions surface-subsurface sont présentes n'admettent pas de solutions analytiques. L'approche de validation classique fondée sur la comparaison de résultats de simulations numériques à des solutions analytiques disponibles dans la littérature n'est donc pas applicable. Dès lors, l'évaluation du modèle de transport couplé NIHM-T s'appuie principalement sur une inter-comparaison avec un autre modèle de référence.

L'inter-comparaison de différents modèles intégrés est en partie obérée par le fait que les modèles en question peuvent disposer de physiques différentes (plus exactement de simplifications différentes de la physique), de méthodes de couplage différentes entre les compartiments, et enfin de techniques et autres approximations numériques différentes. De fait, il faut alors voir l'exercice d'inter-comparaison comme le lieu d'une analyse générale de

comportement de chacun des modèles et sans nécessairement vouloir prétendre qu'un modèle puisse être meilleur qu'un autre.

Dans le cadre d'inter-comparaisons de modèles et relatives au problème d'écoulement, Sulis et al. (2010) ont comparé deux modèles hydrologiques distribués et couplés surface-subsurface, ParFlow (Kollet and Maxwell, 2006) et CATHY. Ils ont examiné les différentes approches de couplage mises en œuvre dans les deux modèles et ont relevé un bon accord entre les modèles pour les expériences de simulation menées, avec toutefois une sensibilité différenciée des modèles aux conditions d'excès d'infiltration et d'hétérogénéité. Une étude de Maxwell et al. (2014) a également comparé sept modèles couplés surface-subsurface, au travers d'une série de cas tests de référence. Les résultats ont montré une bonne cohérence entre les modèles sur les cas les plus simples. Néanmoins, les cas tests les plus compliqués font ressortir des différences accrues, en grande partie liées aux représentations des processus physiques et aux approches de résolution numérique des modèles. Pour autant, le comportement « qualitatif » général des sept modèles testés reste assez similaire.

Dans ce qui suit, nous présentons un cas test synthétique dans le but principal d'évaluer la qualité du modèle couplé à dimension réduite NIHM-T, et principalement les effets d'interaction surface-souterrain sur le problème du transport, attendu que le modèle a déjà fait l'objet de multiples tests (concluants) au regard des flux en eau échangés entre compartiments (Pan et al., 2015 ; Jeannot et al., 2018, 2019).

Pour ce scénario, on compare les résultats obtenus avec NIHM-T 2-D aux résultats de simulations 3-D issus du modèle intégré CATHY choisi comme référence. Ce choix s'appuie sur la capacité du modèle CATHY à simuler les écoulements d'eau et le transfert non réactif de solutés en trois dimensions de façon couplée surface-subsurface. Il a été validé et appliqué dans des conditions variées et il figure parmi les modèles distribués et couplés surface-subsurface les plus utilisés et les plus performants rapportés par la littérature (Weill et al., 2011 ; Gatel et al., 2019, 2020 ; Gatto et al., 2021).

Dans le modèle CATHY, l'écoulement est représenté en subsurface par l'équation de Richards tridimensionnelle et en surface par l'équation de l'onde diffusive résolue en 2-D (Camporese et al., 2010). Le transport de surface est décrit par l'équation 2-D d'advection-dispersion analogue à l'équation utilisée dans le modèle d'écoulement en surface, et résolu par le schéma Muskingum – Cunge explicite (Orlandini and Rosso, 1996), tandis que le transport

souterrain est décrit par l'équation d'advection-dispersion en 3-D. La discrétisation dans l'espace s'accompagne d'une séparation des opérateurs : l'advection est calculée à partir de la méthode des volumes finis alors que la diffusion et la dispersion sont discrétisées avec la méthode des éléments finis (Mazzia and Putti, 2005 ; Weill et al., 2011).

CATHY utilise un schéma de couplage itératif qui permet de résoudre correctement les problèmes d'écoulement et de transport dans le compartiment souterrain avec un seul « long » pas temps sans être contraint à des calculs à tous les pas de temps nécessaires pour la résolution de l'écoulement en surface. A l'opposé, l'écoulement dans NIHM-T est fondé sur une procédure dite « fully implicit », au sens où la résolution de l'écoulement de surface et de l'écoulement souterrain est faite simultanément.

Concernant l'approche de couplage surface-subsurface des flux de solutés, d'un côté, le modèle CATHY s'appuie sur l'approche de changement de conditions à la limite, comme celle utilisée pour modéliser le couplage surface-subsurface des flux d'eau (Weill et al., 2011). Cette approche consiste à fixer une condition à l'interface pour chaque maille, et ce en fonction des processus ayant lieu au niveau de la surface topographique. Pour l'équation de transport souterrain, une condition mixte de type Cauchy gère les flux advectif et dispersif aux limites et elle est actualisée en fonction de l'hydrodynamique simulée. Des termes sources vers la surface sont évalués en fonction des flux d'eau et de solutés dans le milieu souterrain de façon à conserver la masse.

Dans le modèle NIHM-T, les échanges entre le milieu souterrain et le modèle de ruissellement de surface sont représentés par un flux du premier ordre à travers une couche superficielle d'interface, d'épaisseur l_e et de conductivité hydraulique $K_{interface}$, entre les deux compartiments et en introduisant un coefficient d'échange Q_{ech} et la concentration C^* . Cette dernière représente soit la concentration de soluté en surface lors de l'infiltration soit la concentration en subsurface lors de l'exfiltration (voir Section 2.2.4).

Dans le compartiment souterrain de NIHM-T, une concentration imposée sur une section est équivalente à une concentration moyenne imposée sur la colonne verticale traversant toute l'épaisseur de l'aquifère qui la couvre. A noter que la concentration dans CATHY n'est pas nécessairement imposée uniforme sur toute l'épaisseur de la subsurface.

4.1.1. Cas test convergent hétérogène

4.1.1.1. Description du domaine

Le scénario 9 (S9) est conçu pour tester le modèle couplé NIHM-T sur une géométrie complexe et dans des conditions d'hétérogénéité de milieu, à partir du même champ de conductivité hydraulique à saturation que celui du scénario S8. La géométrie 2-D du domaine est également la même que celle présentée pour S8, seul le fond du domaine en 3-D dans S9 est horizontal et n'est pas bosselé. Le domaine souterrain est délimitée par la surface topographique et le fond horizontal plat situé à 20 m en dessous de l'exutoire, comme le montre la figure 4.1. Les caractéristiques du cas test sont ajustées pour générer du ruissellement de surface par exfiltration en bas de pente du domaine. Du soluté, injecté dans le domaine souterrain, doit sortir à travers la surface du sol pour rejoindre le compartiment de surface, permettant ainsi de tester l'algorithme de couplage surface-subsurface du transport.

Toutes les limites latérales du domaine souterrain sont considérées comme imperméables, impliquant que l'eau souterraine ne puisse sortir autrement que par exfiltration vers le compartiment de surface. Le niveau horizontal initial de la nappe se trouve à 1 m de profondeur en dessous de l'exutoire (soit encore à 19 m d'élévation par rapport au zéro pris au fond de la nappe). Les coefficients de Van Genuchten sont fixés à $\alpha = 1 \text{ m}^{-1}$ et $n = 2$. La porosité, la teneur en eau résiduelle et le coefficient d'emmagasinement sont uniformes et respectivement égaux à 0.15, 0.08 et $5.0 \times 10^{-4} \text{ m}^{-1}$. Une précipitation uniforme de $2.0 \times 10^{-7} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ est imposée sur tout le domaine de surface initialement sec pendant 40 jours, suivie d'une période de récession de 20 jours. Le coefficient de rugosité de Manning et la longueur de couplage l_e sont fixés à $0.15 \text{ s} \cdot \text{m}^{-1/3}$ et à 0.0175 m, respectivement. Le coefficient d'échange de $K_{interface}$ est hétérogène dans l'espace et correspond à la conductivité à saturation de la couche souterraine la plus proche de la surface. Le problème d'écoulement pour ce cas test a été validé par Jeannot et al. (2018).

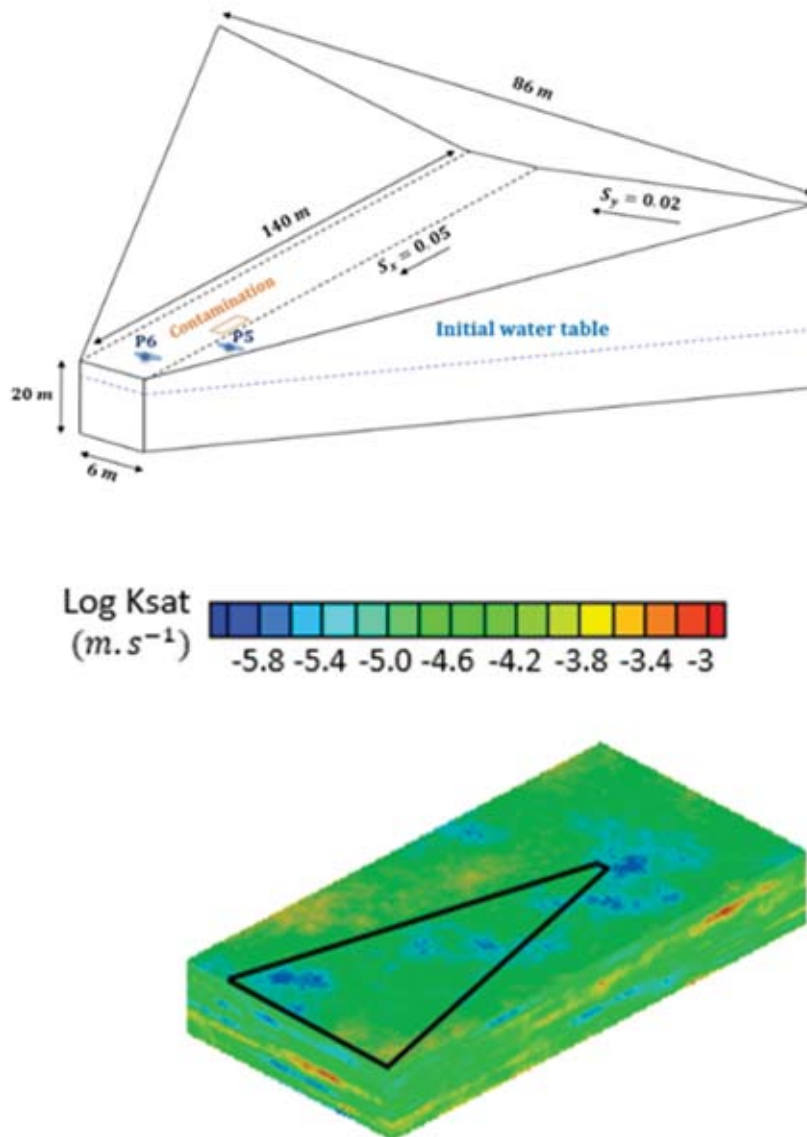


Figure 4.1 : Configuration géométrique du cas test convergent hétérogène et champ de conductivité hydraulique à saturation dans le compartiment souterrain (le triangle noir comme trace en surface du domaine).

Pour le problème de transport de soluté, une concentration initiale unitaire $C=1$ est imposée et injectée en souterrain sur les mailles proches de la surface positionnées dans la zone $x = 100 - 110$ m, $y = 42 - 46$ m, pendant 25 jours, tandis que la concentration dans l'eau de surface est initialement fixée à zéro. Le coefficient de dispersivité longitudinale est pris égal

à $\alpha_L = 5$ m, les coefficients de dispersivité transversale horizontale et verticale (pour le 3-D) sont égaux à $\alpha_T = 0.5$ m, et le coefficient de diffusion moléculaire est égal à 10^{-9} m².s⁻¹.

Le maillage de surface de CATHY a été généré à partir d'éléments carrés de $2\text{ m} \times 2\text{ m}$ (Jeannot et al., 2018) construit depuis un modèle numérique de terrain (MNT), et se compose de 434 700 éléments et 79 304 nœuds. Chaque carré est ensuite divisé en deux éléments triangulaires pour construire le maillage de surface et de subsurface de NIHM composé de 3 220 éléments et 1 724 nœuds. Le domaine souterrain dans CATHY est discrétisé verticalement sur la base de 45 couches d'épaisseur croissante le long de la direction verticale. Le maillage est raffiné à la surface avec des couches fines d'épaisseur allant de 1 à 5 cm, pour décrire correctement le processus d'infiltration, mais atteint plusieurs mètres d'épaisseur pour la couche la plus profonde. Pour disposer de résultats de simulation calculés dans une représentation initiale similaire de l'hétérogénéité entre NIHM-T et CATHY, le nombre de pas d'espace choisi pour calculer les paramètres équivalents intégrés (verticalement) dans NIHM est également de 45, soit une intégration sur 45 couches par la méthode des rectangles. Le pas de temps maximal est fixé à 1 heure dans les deux modèles.

4.1.1.2. Analyse du transfert des solutés non réactifs

Afin de vérifier que le modèle NIHM-T couplé reproduit correctement les principaux mécanismes de transport de solutés, différentes sorties du modèle sont examinées pour le problème de transport. La figure 4.2 présente, en premier lieu, les résultats de flux d'eau et de soluté à l'exutoire des modèles NIHM-T et CATHY.

Le débit d'eau à l'exutoire atteint son pic au 40^{ème} jour, suivi d'une lente récession, conséquence de gradients de charge décroissants après l'arrêt des précipitations. Le flux de soluté à l'exutoire atteint son pic au 25^{ème} jour, suivi d'une récession après l'arrêt de l'injection du contaminant.

Une première observation permet de constater que les deux modèles produisent des hydrogrammes d'eau et de soluté assez similaires, avec de petites différences surtout à la montée en débit. En effet, NIHM-T montre des réponses et des dynamiques d'écoulement plus rapides que CATHY suite à l'événement pluvieux (Jeannot et al., 2018). Ceci est principalement le fait de NIHM-T ne prenant pas complètement compte du stockage d'eau dans

la zone non saturée, ce qui accélère l'infiltration des précipitations et la montée des niveaux de la nappe. En raison d'une exfiltration anticipée dans NIHM-T, le soluté initialement présent dans les premiers centimètres d'une partie de la subsurface, passe un peu plus tôt en surface et se transporte plus rapidement vers l'aval. Dans CATHY, l'eau chargée en soluté se stocke en partie dans la zone non saturée pendant le processus d'infiltration. Par conséquent, le flux de soluté à l'exutoire présente une montée en masse concave dans NIHM-T et plutôt convexe dans CATHY.

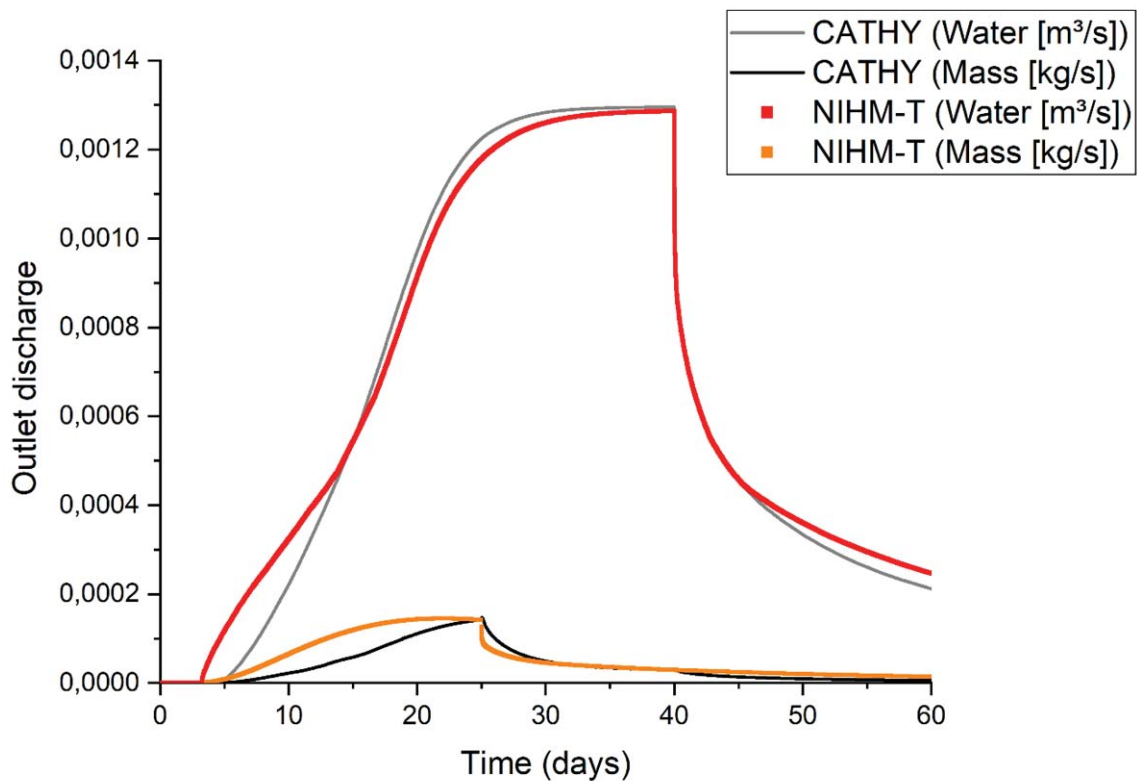


Figure 4.2 : Evolution en fonction du temps des flux à l'exutoire - cas test convergent (S9).

La Figure 4.3 représente les évolutions dans le temps des concentrations en subsurface simulées par les modèles NIHM-T et CATHY aux P5 ($x = 112 - 114$ m, $y = 46 - 48$ m), et P6 ($x = 134 - 136$ m, $y = 40 - 42$ m), reportés en Figure 4.1. On constate que les comportements de NIHM-T et de CATHY sont très similaires, avec seulement des petites différences,

probablement liées au fait que chacun des deux modèles se base sur différentes techniques numériques de résolution et de couplage surface-subsurface.

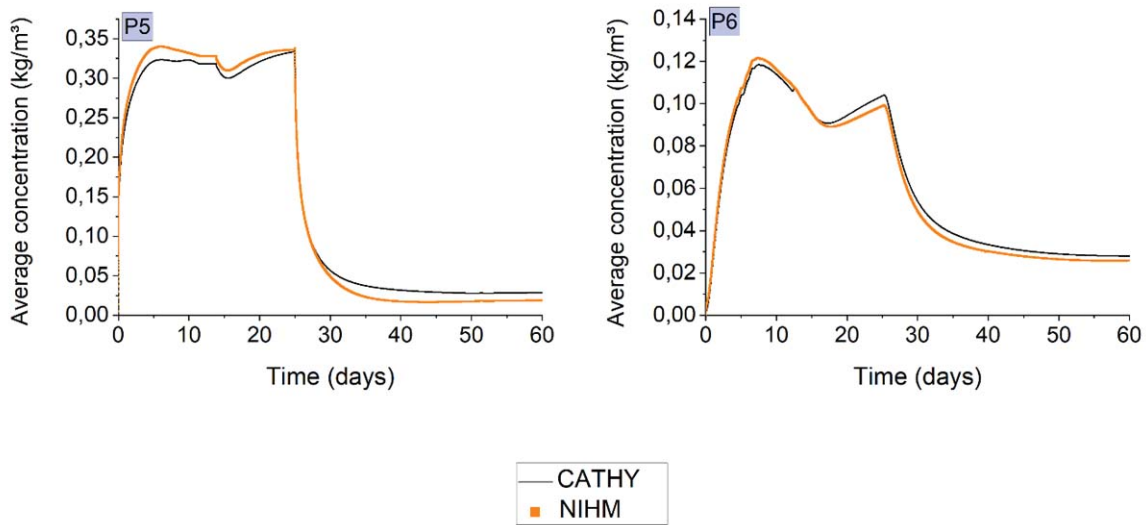


Figure 4.3 : Comparaison des évolutions dans le temps des concentrations aux emplacements P5 et P6 - cas test convergent (S9).

Ces différences sont dues, en partie, au fait que NIHM-T échange la concentration en surface avec une concentration moyenne sur la verticale du compartiment souterrain via un terme du premier ordre, tandis que CATHY échange le flux massique en surface avec celui de la première maille sous la topographie. Il s'agit d'un problème en 3-D, et donc physiquement la lame ruisselante échange uniquement avec la première couche de sol. Par conséquent, alors que les bilans de flux en eau sont très similaires dans les deux modèles, on constate une légère surestimation des concentrations dans NIHM-T pendant les premières dizaines de jours (Figure 4.3). Cependant, puisque la précipitation atteint la nappe plus rapidement dans le modèle réduit, la tendance est à stocker plus intensément en subsurface en direction de l'exutoire, engendrant ainsi un cumul d'infiltration supérieur et des surfaces en eau plus faibles (Jeannot et al., 2018). Ce phénomène peut justifier les valeurs de concentration un peu plus faibles dans NIHM-T après l'arrêt de l'injection du soluté.

Même si la résolution du problème écoulement-transport dans NIHM-T est réalisée de façon simultanée (entre surface et subsurface, écoulement et transport restants calculés

séquentiellement dans NIHM), contrairement à CATHY où la résolution se fait de manière séquentielle, on constate un gain en temps de calcul très important avec un facteur 6 entre le temps CPU requis par CATHY et celui requis par NIHM-T.

En conclusion, les résultats de la simulation, réalisée sur une géométrie complexe et pour un champ de perméabilité hétérogène et en présence des interactions surface-subsurface, montrent une bonne adéquation générale entre NIHM-T et le modèle tridimensionnel CATHY faisant référence. Les différences de comportement entre les deux modèles restent acceptables. Le modèle couplé à dimension réduite s'avère également capable de reproduire les processus de transferts dans une géométrie complexe, avec un gain de temps CPU significatif.

4.2. Application du modèle couplé à dimension réduite NIHM-T : L'île du Rohrschollen

L'analyse des cas tests synthétiques étudiés précédemment a permis de valider le modèle réduit intégré NIHM-T. Dans cette partie, le modèle est appliqué à un hydrosystème hautement transitoire récemment restauré : l'île du Rohrschollen, une île artificielle située à 8 km au sud de Strasbourg (Haut-Rhin, France (Figure 4.4)).

4.2.1. Présentation du site et description du domaine

Le Rohrschollen est une île fluviale du Rhin qui a subi l'aménagement passé du fleuve et la création d'ouvrages d'ingénierie (canalisation et barrages en majorité) pour lutter contre les inondations et développer la navigation et l'agriculture. L'île du Rohrschollen était régulièrement inondée par le passé. Cette ancienne dynamique de crues donnait lieu à d'importantes fluctuations de la nappe phréatique au sein de l'île et à une activité hydromorphologique intense. Cela maintenait les interactions entre les compartiments de surface et de subsurface et favorisait la création et la conservation de la biodiversité pour les habitats aquatiques et fluviaux. La canalisation du Rhin avec deux barrages aux extrémités de l'île et une centrale hydroélectrique ont engendré une déconnexion hydrologique du réseau principal de drainage en chenaux anastomosés parcourant l'île (le Bauerngrundwasser-BGW) du canal du Rhin, ainsi qu'une atténuation de la dynamique des eaux souterraines le long de

l'île. La dynamique hydrologique et géomorphologique de la zone a par conséquent été massivement impactée (Eschbach et al., 2017).



Figure 4.4 : Carte de présentation de la zone d'étude – île du Rohrschollen.

En 2012, l'Union européenne a financé un projet européen LIFE + afin de restaurer les processus hydromorphologiques et écologiques de l'île du Rohrschollen et tenter de rétablir une partie de la dynamique ancienne du système. De l'eau du Rhin est désormais injectée par une vanne dans un nouveau canal artificiel de 900 m de long, construit au sud de l'île et traversant le BGW. Le débit injecté dépend du débit du Rhin et varie entre une valeur de base constante de $2 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, lorsque le débit du Rhin ne dépasse pas $1550 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, et une valeur maximale de $80 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. Ces injections contribuent à réactiver les flux d'eau dans l'île, particulièrement dans le

BGW, rétablir la dynamique du charriage, le renouvellement des écosystèmes aquatiques et fluviaux et stimuler les échanges d'eaux de surface et souterraine.

Un suivi à haute résolution temporelle a été réalisé au droit de 10 transects d'étude à partir d'un réseau dense de piézomètres mis en place le long du BGW et du canal artificiel (Figure 4.5). Une campagne de mesures LiDAR topographique aéroporté a également été réalisée en 2015 et a fourni des informations topographiques et sédimentologiques assez précises relatives à l'île du Rohrschollen.

L'ensemble de ces informations a été utilisé pour décrire la géométrie de l'île puis simuler sa réponse hydrologique au moyen de NIHM (Jeannot et al, 2018). Ces travaux se sont focalisés sur la modélisation des processus d'écoulement et l'impact du projet de restauration sur la réponse du système, mais sans inclure la problématique des processus de transport de solutés. La discrétisation du domaine a été générée à partir de l'image topographique à haute résolution, conduisant à un maillage de résolution spatiale 10 m le long du réseau drainant et jusqu'à une distance latérale au réseau de 120 m, puis une résolution de 20 m pour le reste du domaine (Jeannot et al. 2018). Les largeurs du canal artificiel et du BGW étant supérieures à 10 m, Jeannot et al. (2018) ont réussi à décrire correctement la topographie du chenal par des mailles 2-D de résolution 10 m. Dès lors, le routage de surface, usuellement en réseau de liens 1-D connectés dans NIHM, est ici remplacé par un ruissèlement de surface 2-D, préférentiellement actif sur des mailles de plus basse topographie. De fait, la version de NIHM utilisée pour modéliser l'île, couple l'écoulement souterrain 2-D à une couche de ruissellement 2-D. La même représentation est adoptée pour la modélisation du problème de transport.

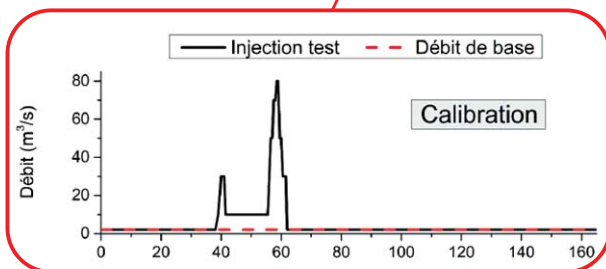
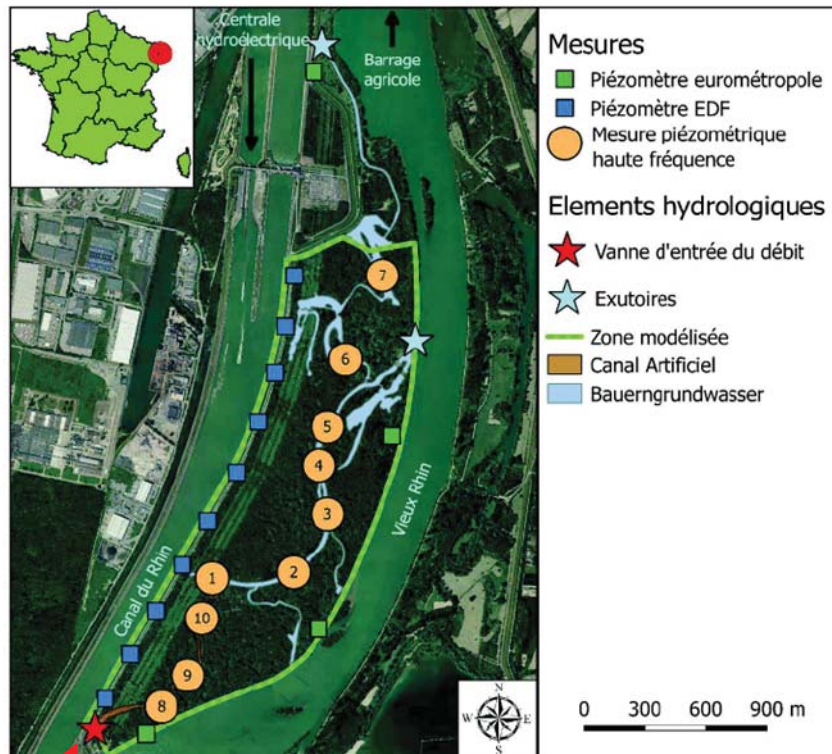


Figure 4.5 : Présentation des points d’observations hydrologiques sur l’île du Rohrschollen et d’un des scénarios tests de réponse de l’île à une injection « type » dans le canal d’entrée. Modifié de Jeannot et al. (2018).

4.2.2. Scénario de la modélisation du problème d’écoulement

Le problème d’écoulement sur l’île du Rohrschollen décrit brièvement ci-après a été réalisé et validé par Jeannot et al. (2018) dans le cadre de l’évaluation de la capacité du modèle NIHM à capturer les caractéristiques de l’écoulement pour un système hétérogène, marqué par un comportement hydrodynamique très réactif.

Deux périodes de temps ont été simulées par Jeannot et al. (2018) ; la première a servi de période de calibration pendant laquelle plusieurs paramètres ont été ajustés, en partie en fonction des données disponibles, et la seconde période a été utilisée dans le cadre d'une simulation de prévision et de validation.

On s'intéresse dans notre étude à une injection type réalisée dans le canal d'entrée et dont les conséquences ont été hydrauliquement modélisées par NIHM dans sa phase de « calibration ». La période d'injection s'étend du 9 décembre 2014 au 15 décembre 2014 avec deux pics de débit, cette expérience (réelle) ayant initialement été conçue afin de suivre et évaluer la stabilité des berges de la partie amont du nouveau canal artificiel. L'évolution dans le temps des débits d'injection est reportée sur la figure 4.5.

Pour représenter la présence du canal du Rhin à l'Ouest et du Vieux Rhin à l'Est, des conditions aux limites de Dirichlet ont été fixées à partir des mesures piézométriques collectées par la ville de Strasbourg et EDF sur les limites Est et Ouest de l'île. Ces conditions aux limites prescrites sont transitoires avec par conséquent une remise à jour au cours du temps en fonction des données observées. Les rives Sud et Nord de l'île sont prises comme des limites imperméables en raison, à la fois du manque de données au Nord, et de la présence d'un barrage de dérivation à l'extrémité sud de l'île qui détourne la majeure partie du débit de la rivière dans le canal du Rhin à la rive Ouest de l'île (Figure 4.5). Par conséquent, il ne peut entrer et sortir d'eau dans le système que par l'écoulement de surface, en entrée au Sud par le canal d'alimentation, en sortie au Nord par l'exutoire du BGW.

Un terme source de $2 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ est imposé initialement à l'entrée du canal artificiel, puis les conditions aux limites décrites plus haut sont appliquées jusqu'à l'obtention d'un régime d'écoulement permanent. On rappelle que le débit d'injection de $2 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ est celui imposé en routine hors périodes d'injections forcées et lorsque le débit du Rhin est inférieur à $1550 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$.

Les valeurs et la distribution des principaux paramètres du sol ont été pré-conditionnés et cartographiés à l'aide de mesures de terrain et de considérations géomorphologiques, attendu que la structure de l'île est assez bien connue. Les caractéristiques morfo-sédimentaires de l'île ont été étudiées à l'aide de cartes historiques et d'une étude sédimentologique. Le modèle souterrain a été paramétré à partir de la cartographie des bancs de sédiments grossiers (graviers, galets...) et de leur granulométrie (Eschbach et al., 2017). L'aquifère se caractérise par une

forte hétérogénéité de la conductivité hydraulique, probablement en liaison avec la présence d'anciens bancs de graviers affleurant sur le fond et les berges du BGW. Une estimation de la distribution du champ de conductivité hydraulique à saturation a été construite à partir des informations géomorphologiques collectées. Les coefficients d'échange entre les compartiments de surface et souterrain ont également été prédéterminés à l'aide des informations issues des études sédimentologiques.

Jeannot et al. (2018) ont d'abord réalisé une première simulation avec le modèle NIHM en utilisant l'hétérogénéité décrite précédemment. Une calibration manuelle a ensuite été entreprise pour diminuer le RMSE (root mean square error) et augmenter le coefficient d'efficacité de Kling-Gupta (KGE, (Gupta et al., 2009)), sur les données de piézométrie disponibles. Ces deux indicateurs (KGE et RMSE) fournissent une indication sur la concordance entre les piézométries observées et simulées. Le champ de conductivité hydraulique à saturation et le rapport entre la conductivité hydraulique à saturation de la couche d'interface et son épaisseur ont permis à NIHM de maximiser le KGE tout en réduisant le RMSE, et d'obtenir par conséquent une bonne adéquation entre piézométries mesurées et simulées, comme le montre la figure 4.6.

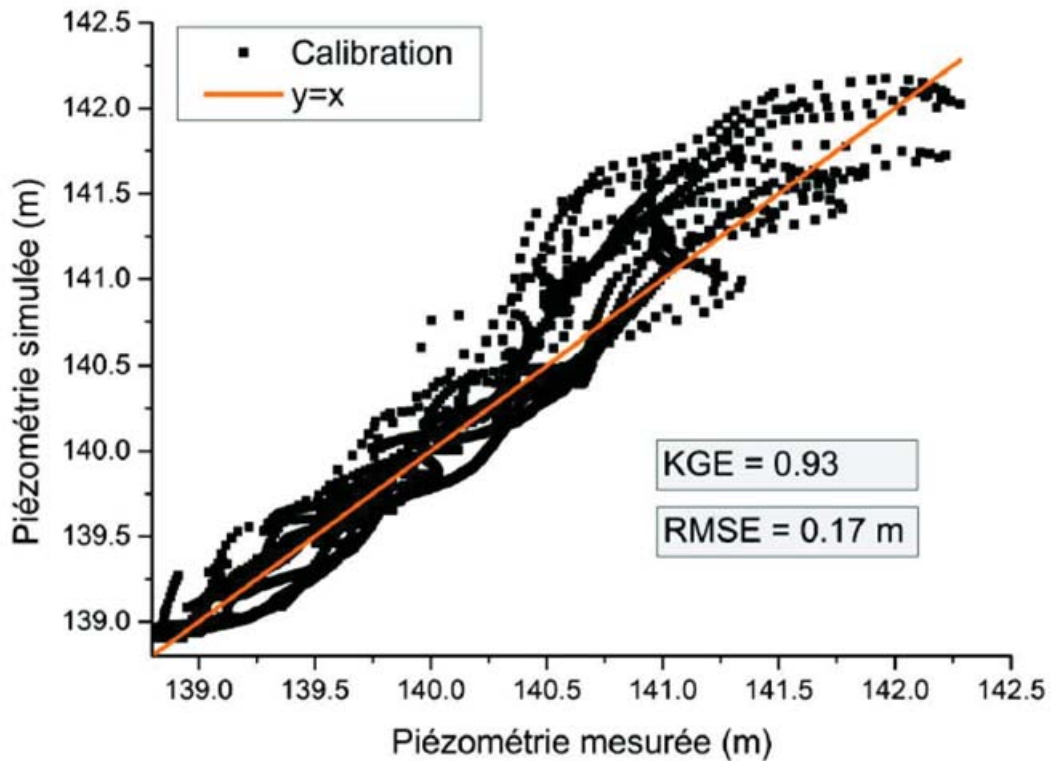


Figure 4.6 : Piézométrie simulée par NIHM en fonction de la piézométrie mesurée correspondante, pour tous les piézomètres du projet LIFE+ de l'île du Rohrschollen, pendant la période de calibration. Jeannot et al. (2018).

Une valeur KGE de 1 ou une valeur RMSE de 0 indiquent un accord parfait entre observations et simulations.

Les résultats de la simulation du problème d'écoulement effectuée par Jeannot et al. (2018) ont montré que le débit de base dans le canal artificiel permet d'alimenter en eau le BGW ainsi que certains paléo-chenaux. Ensuite, les injections de débits plus forts ont engendré l'apparition de zones humides en surface, surtout dans la partie Sud de l'île, avec des lames d'eau atteignant jusqu'à 3 mètres lors de l'injection du débit de pointe à $80 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. En subsurface, une infiltration rapide de l'eau de surface est constatée, causant ainsi la création d'un dôme piézométrique qui s'étend le long du canal artificiel. Après 4 jours de récession, les zones humides ont presque toutes disparues, et la nappe a rapidement retrouvé son état d'équilibre, mais avec plus de volume d'eau stocké.

4.2.3. Scénario de la modélisation du problème de transport

Pendant la période de calibration présentée ci-avant, le modèle d'écoulement réduit est parvenu à reproduire correctement l'évolution des charges et la dynamique de variation des piézométries en chacun des points d'observation (Jeannot et al, 2018).

La partie qui suit a pour objet d'étudier, à partir du modèle calibré, les réponses du modèle en terme de transfert de solutés dans l'hydrosystème fluvial de l'île du Rohrschollen et d'évaluer les effets des échanges surface-souterrain restaurés sur les processus de transport.

Puisque les historiques de contamination sont mal connus, les résultats des simulations concernant le transfert des solutés ne seront pas comparés à des données de terrain, et les conditions initiales sont choisies en accord avec les objectifs de l'étude. A l'état initial, la concentration de soluté est nulle dans tout le domaine, sauf à la vanne d'entrée où une concentration constante de soluté $C_{inj} = 1 \text{ g/l}$ est injectée. Ensuite, la même valeur de concentration C_{inj} est réinjectée en amont du système à chaque pic de débit d'injection d'eau (ayant pour effet d'augmenter la masse de soluté entrante lors d'injections). La simulation se déroule sur 160 jours.

La figure 4.7 représente la distribution spatiale de la concentration du soluté dans les lames d'eau de surface dans le compartiment de ruissellement 2-D, à 3 temps de la période de simulation (premier et deuxième pics de débit d'injection, et après une récession de 4 jours). L'augmentation de la masse de soluté est associée à un apport accru en eau de surface pendant les injections. Le transport de soluté, avec apport supplémentaire en deux temps lorsque l'eau est injectée depuis la vanne d'entrée, dépend de l'état des réseaux hydrographiques de la zone. En réponse aux deux pics d'injection d'eau dans le canal, les lames d'eau véhiculées par le BGW augmentent significativement, engendrant l'apparition des zones humides et l'inondation de la partie Sud de l'île (Jeannot et al, 2018), et ainsi le transport de solutés en surface. La figure 4.7 montre qu'en imposant un débit d'entrée supérieur, le soluté est transporté avec les lames d'eau et traverse toute l'île. Les zones humides apparues suite aux pics d'injection de débit sont également porteuses de soluté.

La figure 4.8 représente les résultats de l'évolution temporelle des concentrations en quatre endroits le long du BGW et qui correspondent à des points de mesure sur les rives gauche et droite du BGW (T1, T3, T6 et T8, Figure 4.5). Les résultats de la figure 4.8 montrent des

montées en concentrations de soluté transporté suite aux excès d'eau des deux injections dans les piézomètres. On constate également que le temps moyen d'arrivée de soluté en T6 est plus long par rapport aux piézomètres T1, T3 et T8. Le front de concentration atteint progressivement le piézomètre T6 après une première injection de débit à $30 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, et le premier pic de concentration est observé à $t=59 \text{ h}$, qui correspond au deuxième pic d'injection de débit à $80 \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. L'impact des injections de débit y est donc atténué, en raison de sa position très en aval par rapport à la vanne d'injection. Par comparaison, le soluté atteint les piézomètres T1, T3 et T8 dans les premières heures qui suivent la première injection de soluté en temps initial. Etant donné que le soluté est injecté dans les eaux de surface, en retrouver rapidement dans les eaux souterraines signifie que même le débit de base permet la ré-infiltration dans le système souterrain. Ensuite, pendant la période de récession, les valeurs de concentrations diminuent à cause de l'arrêt de l'injection de soluté, puis se stabilisent pendant la période de relaxation, au cours de laquelle les hauteurs d'eau reviennent à l'état d'équilibre imposé par les niveaux d'eau des limites Est et Ouest du système.

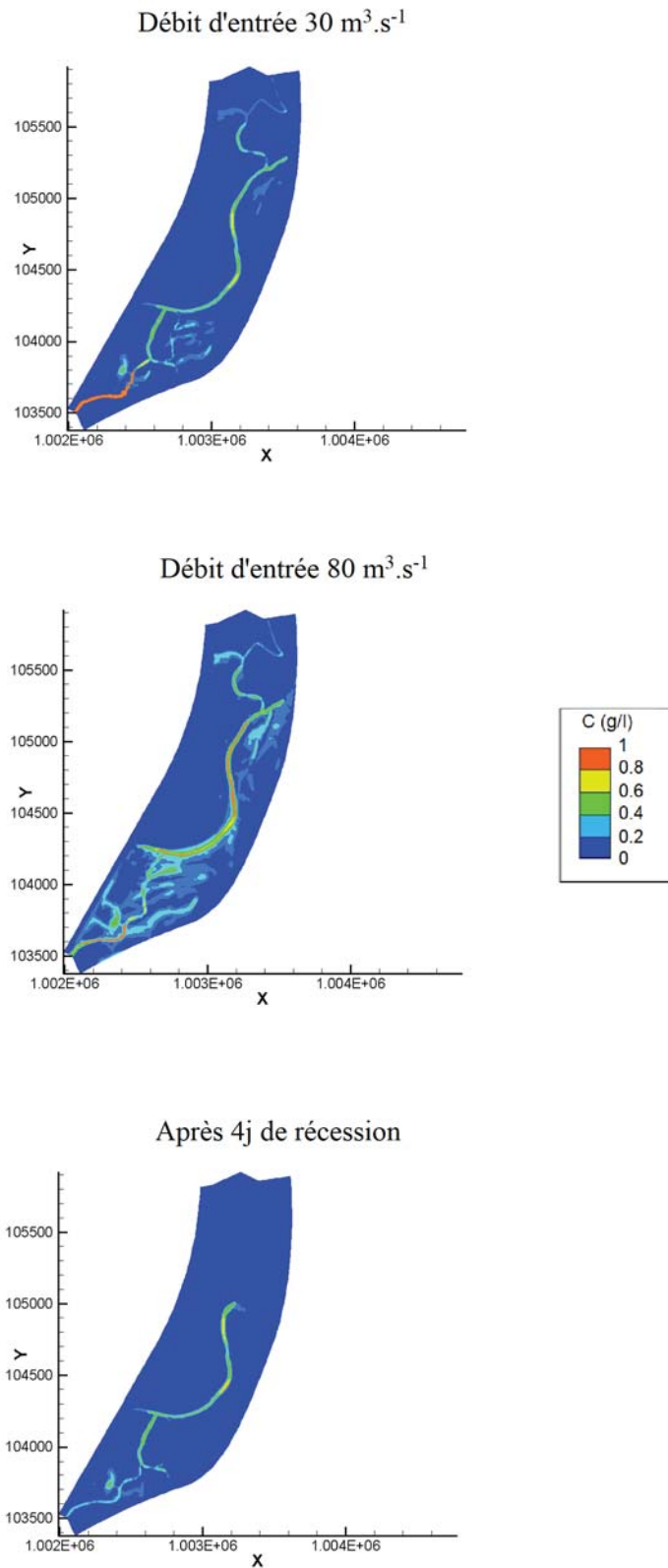


Figure 4.7 : Distribution spatiale de la concentration de solutés dans la lame d'eau de surface dans l'île du Rohrschollen à 3 temps de la période de calibration.

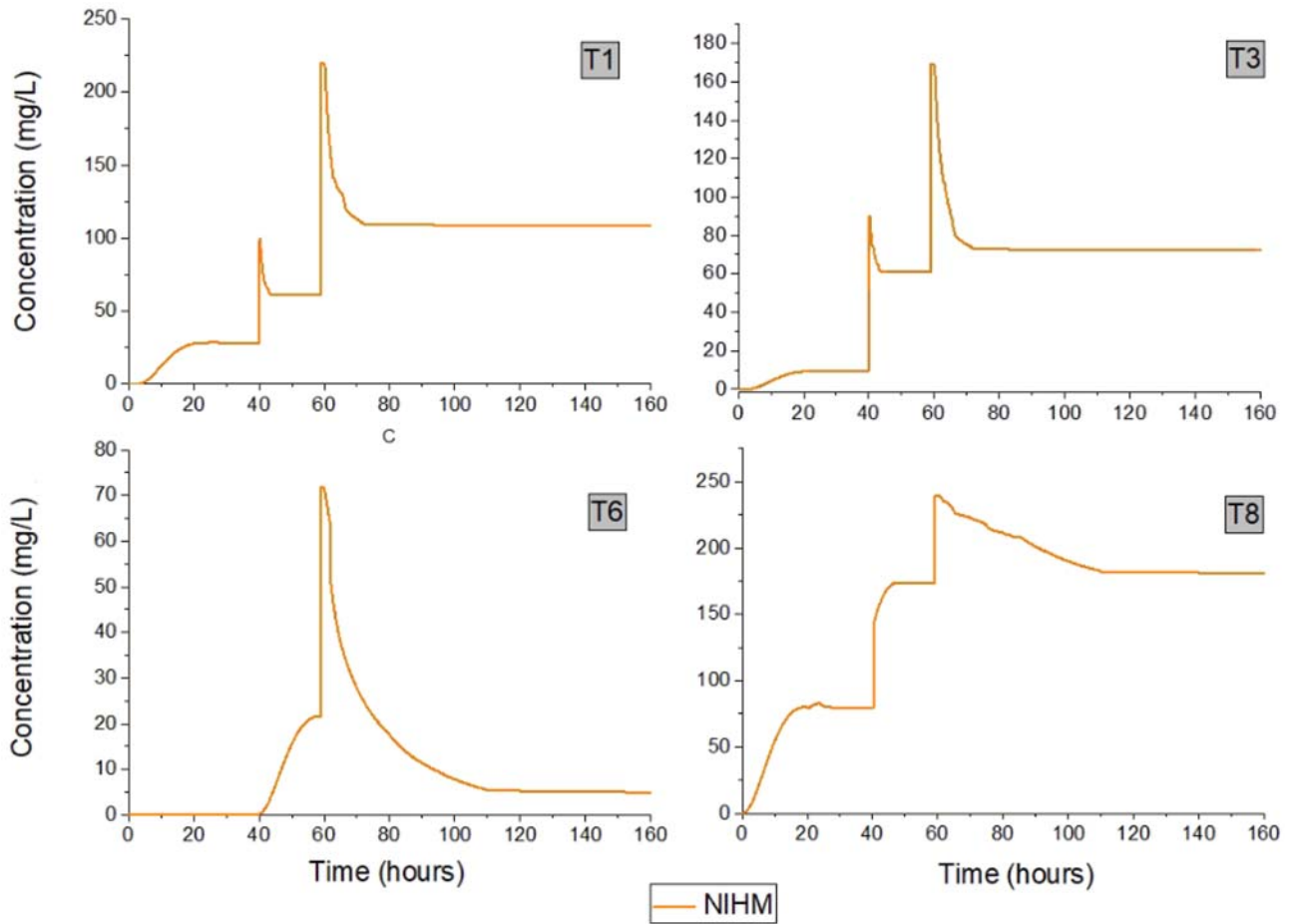


Figure 4.8 : Evolution temporelle des concentrations de solutés pour 4 piézomètres de l'île du Rohrschollen.

La figure 4.9 représente la distribution spatiale de la concentration du soluté dans le compartiment souterrain et montre clairement une contamination de la nappe en réponse aux effets des injections de débit en surface et aux interactions surface/souterrain. Les injections forcées de débit engendrent une infiltration rapide de l'eau de surface chargée en soluté, majoritairement dans la partie Sud de l'île. Après 4 jours de récession, une partie de la masse de soluté est sortie du système, tandis qu'une partie est toujours présente dans l'eau stockée dans le compartiment souterrain. Des zones concentrées en soluté sont positionnées en dessous des zones humides contaminées infiltrées. Les deux compartiments sont donc très réactifs en réponse aux injections imposées.

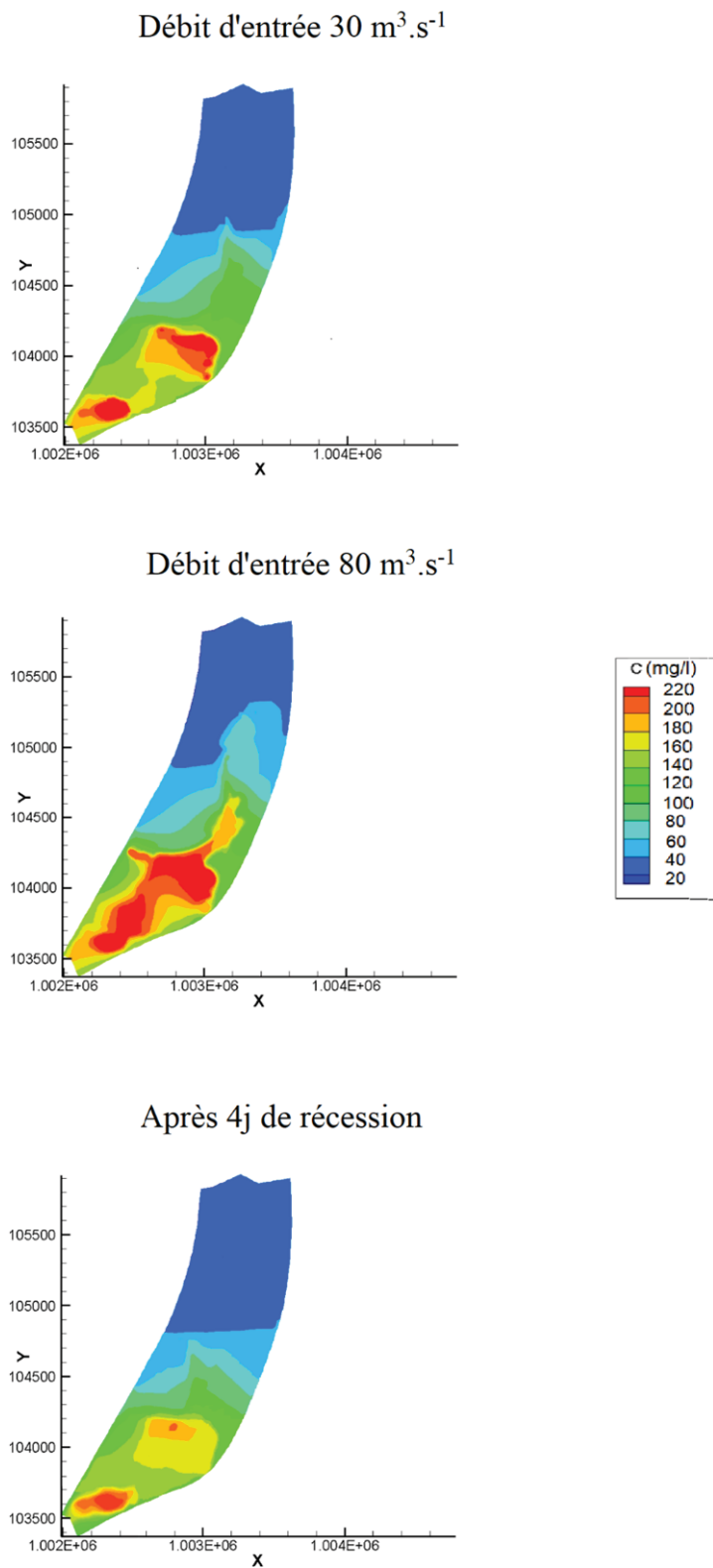


Figure 4.9 : Distribution spatiale de la concentration de solutés dans le compartiment souterrain de l'île du Rohrschollen à 3 temps de la période de calibration.

4.3. Bilan

Le modèle couplé développé NIHM-T a été soumis à deux cas tests, comprenant des interactions entre les compartiments souterrain et surface. Dans un premier cas test synthétique, NIHM-T a été évalué sur un domaine complexe et hétérogène, en menant une inter-comparaison avec le modèle CATHY, modèle hydrologique intégré 3-D largement utilisé en hydrologie. Les résultats ont montré une bonne adéquation générale entre les deux modèles, avec un gain significatif en temps de calcul engendré par la réduction de dimensionnalité de NIHM-T. Ceci suggère que NIHM-T est capable de reproduire correctement le transfert de solutés, en prenant en compte les échanges surface/souterrain. Dans un second temps, NIHM-T a été appliqué à l'île du Rohrschollen à partir du modèle calibré sur ses simulations de flux en eau par Jeannot et al. (2018). Dans ce cas, les résultats n'ont pas été comparés à des données réelles ou aux résultats d'un autre modèle. On note que les études antérieure et actuelle menées sur le système restauré sont plutôt de court terme et n'éclairent pas la compréhension générale des effets longs termes de la restauration. Les résultats de l'étude confirment que les injections de débits réalisées dans le cadre du projet LIFE+ ont permis de redynamiser efficacement les échanges surface/souterrain, en particulier dans le cas présenté, la ré-infiltration d'eau de surface en nappe à partir d'un cours d'eau soumis à débordement.

Récapitulatif et perspectives

Les processus de transfert de soluté dans un hydrosystème sont complexes et impliquent souvent l'existence d'interactions entre les différents compartiments. De nombreux champs d'application de l'ingénierie ou de l'agriculture s'avèrent demandeurs de descriptions de la migration des solutés dans les hydrosystèmes, exercice difficile en raison des divers facteurs qui contrôlent les mécanismes de transport et de la complexité des systèmes hydrologiques. Une modélisation hydrologique dite intégrée (surface et subsurface couplées) devient aujourd'hui un outil de plus en plus utilisé et en pleine évolution. Ces modèles intégrés sont capables de représenter la dynamique du système en prenant en compte les différents processus en jeu et leurs interactions. On s'intéresse particulièrement aux processus de couplages surface/souterrain, mais dans cette approche, la modélisation du transport de soluté reste très complexe et coûteuse. De fait, peu de modèles intégrés introduisent les processus de transport dans leurs modules. Le constat de départ de ce travail est le besoin de développer des modèles intégrés de transfert de solutés performants et moins coûteux. L'objectif général de cette thèse a donc été d'implémenter des processus de transport dans le modèle hydrologique intégré NIHM en tenant compte des interactions à l'interface surface-subsurface, et de valider l'approche de modélisation développée.

Le modèle développé

L'idée de base de notre approche de modélisation a été de poursuivre le développement du modèle intégré NIHM (Normally Integrated Hydrological Model), dédié dans sa version préexistante à la modélisation des processus de l'écoulement des flux d'eau dans trois compartiments (souterrain, ruissellement de surface 2-D et ruissellement en chenaux 1-D). Le modèle souterrain est dit à dimension réduite parce qu'il se fonde sur une intégration de l'équation de Richards 3-D dans la direction perpendiculaire au substratum, et dépend des paramètres hydrodynamiques intégrés sur cette même direction. Le modèle physique d'écoulement de surface 2-D repose sur la simplification des équations de Saint-Venant en ondes diffusives. Le compartiment des écoulements en chenaux 1-D dans NIHM n'a pas été exploité dans ce travail de thèse.

L'implémentation numérique du transport dans les fonctionnalités du modèle s'est inspirée du modèle avancé TRACES, en couplant de manière non intrusive le modèle NIHM (hydraulique) et un module NIHM-T (T = transport) de transport de soluté 2-D hérité de TRACES. Un premier développement des modules de transfert de soluté en subsurface à dimension réduite a été réalisé et validé, suivi d'une mise en place du module de transport en surface. Ensuite, les interactions entre les deux compartiments ont été implémentées. Cette approche non intrusive a nécessité un découpage partiel écoulement et transport, donnant la liberté de choix de maillages différents entre écoulement et transport selon les exigences de chaque technique de résolution. Cela étant, le découplage impose une résolution préliminaire de l'écoulement et le stockage des divers champs de vitesse de l'eau, mais en contrepartie permet le filtrage des champs de vitesses issus du modèle réduit avant passage au module de transport. L'incidence directe est une réduction du coût calcul car seuls les changements significatifs des champs de vitesse sont pris en compte et les pas de temps courts éventuellement imposés par la résolution non-linéaire de l'écoulement peuvent être rallongés pour le traitement du transport.

Le transport de soluté en subsurface est décrit par l'équation classique d'advection-dispersion, intégrée le long de la direction locale normale à la base de l'aquifère. Les méthodes numériques utilisées sont les éléments finis mixtes et discontinus. L'équation de transport est divisée en deux parties : une partie advective résolue par la méthode des éléments finis de Galerkin discontinus, et une autre dispersive résolue par la méthode des éléments finis hybrides mixtes. Ensuite, un modèle de transport de solutés en surface a été implémenté dans le modèle NIHM-T à partir d'une démarche similaire à celle présentée pour le module de transport à dimension réduite en subsurface (hormis l'intégration qui n'est pas nécessaire). Le modèle NIHM-T a permis également de traiter les interactions surface/souterrain à partir d'une approche de couplage fondée sur un terme d'échange d'ordre 1 surface-subsurface, aboutissant à la version finale du modèle.

Evaluation et validation du modèle

L'approche d'évaluation du modèle développé a été menée dans un premier temps sur des cas tests synthétiques, en milieux hétérogènes et binaires, ne comportant que le milieu

souterrain pour bien évaluer l'impact de l'intégration des écoulements souterrains 3-D en un formalisme 2-D sur les simulations du transport. Une inter-comparaison a été réalisée entre des différentes sorties de NIHM-T et celles d'un modèle complet TRACES 3-D. Les résultats indiquent que NIHM-T reproduit parfaitement le transport de solutés lorsque le milieu est saturé. Dans des systèmes partiellement saturés, et sous l'hypothèse de l'équilibre hydrostatique le long de la direction d'intégration de l'écoulement, NIHM-T a tendance à négliger les composantes « verticales » de l'écoulement et leurs variations en subsurface. La présence d'écoulements fortement transitoires dans la zone non saturée peut accentuer les écarts entre 2-D intégré et 3-D, majoritairement en raison de la vision différente entre les deux modèles de l'infiltration par la surface.

Lorsque le soluté est injecté uniformément sur toute l'épaisseur du système, NIHM-T reproduit correctement les flux de transfert, puisqu'une injection dans NIHM-T est équivalente à une injection uniforme sur toute la profondeur. Lorsque l'injection a lieu uniquement dans premières couches superficielles du domaine, NIHM-T considère toujours une injection répartie sur toute la profondeur et ne prend pas en compte explicitement l'impact des mécanismes d'infiltration et des composantes verticales de l'écoulement sur le transport des solutés. Par conséquent, la performance du modèle dépend de l'épaisseur relative de la zone non saturée, et des conditions hydrologiques de forçage du système. Au final, les résultats généraux restent pertinents, d'autant que NIHM-T permet de réduire significativement le coût de calcul. Le facteur d'accélération maximal de NIHM-T par rapport à TRACES 3-D dans ces cas tests est de 85.17. Ce travail a donné lieu à une publication déjà parue (Chaguer et al., 2022).

NIHM-T dans sa forme couplée des deux compartiments souterrain et de surface, a été évalué sur un cas test synthétique convergent, adapté pour engendrer des interactions surface – souterrain par exfiltration d'eau de nappe. Attendu que très peu de cas tests impliquant du transport sont discutés dans la littérature, NIHM-T est comparé au modèle CATHY, connu pour sa capacité de simuler en trois dimensions les flux d'eau et de solutés de manière couplée entre la surface et la subsurface. La configuration choisie est caractérisée par un champ de conductivité hétérogène, généré stochastiquement et s'étalant sur 3 ordres de grandeur. Les résultats d'inter-comparaison sont satisfaisants et montrent bon accord entre les deux modèles. Quelques discordances légères ont été relevées, mais elles restent acceptables. Ces écarts sont généralement dû au fait que NIHM-T répartit toujours l'injection du soluté uniformément sur

toute la profondeur et qu'il tend également à sous-estimer le stockage d'eau dans la partie non saturée du compartiment souterrain, et à accélérer l'infiltration. Par conséquent, dans NIHM-T, les solutés présents initialement dans les eaux souterraines sont transférés plus rapidement vers l'exutoire et les valeurs de concentrations en subsurface sont légèrement plus faibles après l'arrêt de l'injection des solutés. En termes de coût calcul, NIHM-T a permis d'accélérer le temps de simulation (écoulement + transport) de 5.94 par rapport à CATHY.

En raison des résultats satisfaisants obtenus dans le cas test précédent, le modèle couplé NIHM-T a ensuite été appliqué au système réel de l'île fluviale du Rohrschollen. Ce système se caractérise par une faible topographie et un niveau de saturation de la subsurface élevé. Dans le cadre du projet de restauration LIFE+, l'île a été équipée d'un réseau dense de piézomètres et surtout d'un canal artificiel qui alimente en permanence le réseau hydrographique de l'île, en injectant en amont un débit variant de $2 \text{ m}^3.\text{s}^{-1}$ à plus de $80 \text{ m}^3.\text{s}^{-1}$ selon le débit du Rhin. A partir du modèle « hydraulique » calibré, l'étude réalisée a permis de simuler les échanges surface/subsurface restaurés par l'alimentation artificielle et leur impact sur le transfert de soluté.

Perspectives

Une modélisation robuste des processus intégrés nécessite d'apporter des mises à jour et des améliorations du code en continu. Le modèle NIHM-T peut encore évoluer et de nombreux défis restent à relever. Cela inclut, par exemple, d'améliorer les algorithmes numériques une meilleure efficacité du modèle, en particulier au registre du coût calcul. On pourrait envisager de développer un couplage séquentiel pour distinguer les pas de temps nécessaires à la simulation de l'écoulement et du transport dans chacun des compartiments souterrain et surface. Si l'efficacité et la précision actuelles de la solution numérique de l'équation d'advection-dispersion est honorable à défaut d'être optimale, il s'avérera intéressant de « doper » rapidement et à moindre coût la problématique transport, par l'adjonction de réactions simples d'un soluté mono-espèce, comme : dégradation- aggradation cinétique, sorption-désorption à l'équilibre local ou cinétique. Ces mécanismes simples sont fréquemment rencontrés dans des cas d'applications pratique. Le coût calcul, d'ores et déjà réduit dans NIHM-T encourage en sus à l'utiliser pour développer des méthodes d'inversion automatique.

D'un point de vue physique, il serait très pertinent de développer un module de correction, capable de prendre en compte, mais en cherchant à faire simple pour ne pas dénaturer la philosophie « parcimonieuse » de NIHM, les composantes verticales d'écoulement et le stockage d'eau dans la partie non saturée, afin de compenser les écarts dus à l'hypothèse de l'équilibre hydrostatique.

Dans une volonté de mieux représenter les interactions surface/subsurface, on pourrait envisager de perfectionner la stratégie de couplage existante pour bien reproduire les échanges advectifs et dispersifs. Il sera aussi intéressant d'intégrer les processus de transport dans le compartiment de ruissellement en chenaux 1-D.

Aujourd'hui, NIHM-T permet un seul type de maillage en triangles, d'autres options de maillages peuvent être développées par la suite pour offrir plus de choix, selon les systèmes étudiés.

Le développement de NIHM-T peut également s'étendre à d'autres processus physiques supplémentaires tels que le transport réactif, complexe cette fois, donc multi-espèces, le transport solide en surface, et le bilan énergétique.

Bibliographie

Abbott, M.B., 1979. Computational hydraulics: elements of the theory of free surface flows. Monographs and surveys in water resources engineering. Pitman Pub. ; Fearon-Pitman Publishers, London : Belmont, Calif.

Abbott, M.B., Refsgaard, J.C. (Eds.), 1996. Distributed Hydrological Modelling, Water Science and Technology Library. Springer Netherlands, Dordrecht. <https://doi.org/10.1007/978-94-009-0257-2>

Abdul, A.S., Gillham, R.W., 1984. Laboratory Studies of the Effects of the Capillary Fringe on Streamflow Generation. Water Resour. Res. 20, 691–698. <https://doi.org/10.1029/WR020i006p00691>

Ackerer, P., Mose R., Ruch M. & Semra K., 1990. MARCHAL: a three-dimensional model for groundwater flow and quality modelling on PC computer. In : Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, Volume Papers of Int. Conf. on Calib. and Rel. in Groundwater Modelling, The Hague, 3-6 Sept. 1990, The Netherlands

Ala-aho, P., Rossi, P.M., Kløve, B., 2015. Estimation of temporal and spatial variations in groundwater recharge in unconfined sand aquifers using Scots pine inventories. Hydrol. Earth Syst. Sci. 19, 1961–1976. <https://doi.org/10.5194/hess-19-1961-2015>

Ambroise, B., 1999. Génèse des débits dans les petits bassins versants ruraux en milieu tempéré : 2 - Modélisation systémique et dynamique. Revue des sciences de l'eau / Journal of Water Science, 12(1), 125–153. <https://doi.org/10.7202/705346ar>

Aris, R., 1956. On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube. Proc. R. Soc. Lond. A 235, 67–77. <https://doi.org/10.1098/rspa.1956.0065>

Auriault, J.L., 1983. Effective macroscopic description for heat conduction in periodic composites. International Journal of Heat and Mass Transfer 26, 861–869. [https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(83\)80110-0](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(83)80110-0)

Azarnivand, A., Camporese, M., Alaghmand, S., Daly, E., 2020a. Simulated response of an intermittent stream to rainfall frequency patterns. *Hydrological Processes* 34, 615–632. <https://doi.org/10.1002/hyp.13610>

Azarnivand, A., Camporese, M., Alaghmand, S., Daly, E., 2020b. Simulated response of an intermittent stream to rainfall frequency patterns. *Hydrological Processes* 34, 615–632. <https://doi.org/10.1002/hyp.13610>

Bear, J., Verruijt, A., 1987. Modeling Groundwater Pollution, in: *Modeling Groundwater Flow and Pollution*. Springer Netherlands, Dordrecht, pp. 153–195. https://doi.org/10.1007/978-94-009-3379-8_6

Beven, K., Germann, P., 1982. Macropores and water flow in soils. *Water Resour. Res.* 18, 1311–1325. <https://doi.org/10.1029/WR018i005p01311>

Botter, G., Bertuzzo, E., Rinaldo, A., 2010. Transport in the hydrologic response: Travel time distributions, soil moisture dynamics, and the old water paradox: A Theory of transport in the hydrologic response. *Water Resour. Res.* 46. <https://doi.org/10.1029/2009WR008371>

Boussinesq, J., 1877. *Essai sur la theorie des eaux courantes*. Memoires presentes par divers savants a l'Academie des Sciences de l'Institut National de France, Tome XXIII, No 1. Imprimerie Nationale, Paris.

Bowles, D.S., O'Connell, P.E. (Eds.), 1991. *Recent Advances in the Modeling of Hydrologic Systems*. Springer Netherlands, Dordrecht. <https://doi.org/10.1007/978-94-011-3480-4>

Broda, S., Larocque, M., Paniconi, C., Haitjema, H., 2012. A low-dimensional hillslope-based catchment model for layered groundwater flow: Low-dimensional hillslope-based catchment model. *Hydrol. Process.* 26, 2814–2826. <https://doi.org/10.1002/hyp.8319>

Brookfield, A.E., Gnau, C., 2016. Optimizing Water Management for Irrigation Under Climate Uncertainty: Evaluating Operational and Structural Alternatives in the Lower Republican River Basin, Kansas, USA. *Water Resour Manage* 30, 607–622. <https://doi.org/10.1007/s11269-015-1180-y>

Brookfield, A.E., Sudicky, E.A., Park, Y.-J., Conant, B., 2009. Thermal transport modelling in a fully integrated surface/subsurface framework. *Hydrol. Process.* 23, 2150–2164. <https://doi.org/10.1002/hyp.7282>

Brutsaert, W., 1994. The unit response of groundwater outflow from a hillslope. *Water Resour. Res.* 30, 2759–2763. <https://doi.org/10.1029/94WR01396>

Camporese, M., Daly, E., Dresel, P.E., Webb, J.A., 2014. Simplified modeling of catchment-scale evapotranspiration via boundary condition switching. *Advances in Water Resources* 69, 95–105. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2014.04.008>

Camporese, M., Paniconi, C., Putti, M., McDonnell, J.J., 2019. Fill and Spill Hillslope Runoff Representation With a Richards Equation-Based Model. *Water Resour. Res.* 55, 8445–8462. <https://doi.org/10.1029/2019WR025726>

Camporese, M., Paniconi, C., Putti, M., Orlandini, S., 2010. Surface-subsurface flow modeling with path-based runoff routing, boundary condition-based coupling, and assimilation of multisource observation data: Surface-subsurface flow modeling. *Water Resour. Res.* 46. <https://doi.org/10.1029/2008WR007536>

Celia, M.A., Bouloutas, E.T., Zarba, R.L., 1990. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resour. Res.* 26, 1483–1496. <https://doi.org/10.1029/WR026i007p01483>

Chaguer, M., Weill, S., Ackerer, P., Delay, F., 2022. Implementation of subsurface transport processes in the low-dimensional integrated hydrological model NIHM. *Journal of Hydrology* 609, 127696. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2022.127696>

Chocat, B., 1997. Aménagement urbain et hydrologie. *La Houille Blanche* 83, 12–19. <https://doi.org/10.1051/lhb/1997057>

Clarke, R.T., 1973. A review of some mathematical models used in hydrology, with observations on their calibration and use. *Journal of Hydrology* 19, 1–20. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(73\)90089-9](https://doi.org/10.1016/0022-1694(73)90089-9)

Cockburn, B., Shu, C.-W., 1998. The Runge–Kutta Discontinuous Galerkin Method for Conservation Laws V. *Journal of Computational Physics* 141, 199–224. <https://doi.org/10.1006/jcph.1998.5892>

Crouzeix, M., Raviart, P.-A., 1973. Conforming and nonconforming finite element methods for solving the stationary Stokes equations I. *R.A.I.R.O.* 7, 33–75. <https://doi.org/10.1051/m2an/197307R300331>

Cunge, J. ., Holly, F. M., & Verwey, A., 1980. *Practical aspects of computational river hydraulics*. Pitman.

Dagan, G., 1989. *Flow and Transport in Porous Formations*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-75015-1>

Dagan, G., Lesoff, S.C., 2001. Solute transport in heterogeneous formations of bimodal conductivity distribution: 1. Theory. *Water Resour. Res.* 37, 465–472. <https://doi.org/10.1029/2000WR900225>

Davison, J.H., Hwang, H.-T., Sudicky, E.A., Mallia, D.V., Lin, J.C., 2018. Full Coupling Between the Atmosphere, Surface, and Subsurface for Integrated Hydrologic Simulation: Integrated hydrologic simulation. *J. Adv. Model. Earth Syst.* 10, 43–53. <https://doi.org/10.1002/2017MS001052>

De Schepper, G., Therrien, R., Refsgaard, J.C., He, X., Kjaergaard, C., Iversen, B.V., 2017. Simulating seasonal variations of tile drainage discharge in an agricultural catchment: Simulating seasonal tile drainage. *Water Resour. Res.* 53, 3896–3920. <https://doi.org/10.1002/2016WR020209>

Deng, Z.-Q., de Lima, J.L.M.P., Singh, V.P., 2005. Transport rate-based model for overland flow and solute transport: Parameter estimation and process simulation. *Journal of Hydrology* 315, 220–235. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2005.03.042>

Deng, Z.-Q., Singh, V.P., Bengtsson, L., 2001. Longitudinal Dispersion Coefficient in Straight Rivers. *J. Hydraul. Eng.* 127, 919–927. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9429\(2001\)127:11\(919\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9429(2001)127:11(919))

Deutsch, C.V. and Journel, A.G., 1997. GSLIB Geostatistical Software Library and User's Guide, Oxford University Press, New York, second edition. 369 pages.

Deutsch, C.V., Journel, A.G., 1997. GSLIB Geostatistical Software Library and User's Guide, Second Edition. ed. Oxford University Press, New York.

Duffy, C.J., 1996. A Two-State Integral-Balance Model for Soil Moisture and Groundwater Dynamics in Complex Terrain. *Water Resour. Res.* 32, 2421–2434. <https://doi.org/10.1029/96WR01049>

Dunne, T., Black, R.D., 04/1970a. An Experimental Investigation of Runoff Production in Permeable Soils. *Water Resour. Res.* 6, 478–490. <https://doi.org/10.1029/WR006i002p00478>

Dunne, T., Black, R.D., 10/1970b. Partial Area Contributions to Storm Runoff in a Small New England Watershed. *Water Resour. Res.* 6, 1296–1311. <https://doi.org/10.1029/WR006i005p01296>

Dunne, Thomas & Moore, T. & Taylor, C., 1975. Recognition and Prediction of Runoff-Producing Zones in Humid Regions. *Hydrol Sci BULL Sci Hydrol.* 20.

Ebel, B.A., Loague, K., 2006. Physics-based hydrologic-response simulation: Seeing through the fog of equifinality. *Hydrol. Process.* 20, 2887–2900. <https://doi.org/10.1002/hyp.6388>

Ebel, B.A., Mirus, B.B., Heppner, C.S., VanderKwaak, J.E., Loague, K., 2009. First-order exchange coefficient coupling for simulating surface water-groundwater interactions: parameter sensitivity and consistency with a physics-based approach. *Hydrol. Process.* 23, 1949–1959. <https://doi.org/10.1002/hyp.7279>

El Soueidy, Ch.P., Younes, A., Ackerer, P., 2009. Solving the advection-diffusion equation on unstructured meshes with discontinuous/mixed finite elements and a local time stepping procedure: Solving the advection-diffusion equation. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 79, 1068–1093. <https://doi.org/10.1002/nme.2609>

Eschbach, D., Schmitt, L., Imfeld, G., May, J.-H., Payraudeau, S., Preusser, F., Trauerstein, M., Skupinski, G., 2017. Long-term river trajectories to enhance restoration efficiency and sustainability on the Upper Rhine: an interdisciplinary study (Rohrschollen Island, France) (preprint). *Rivers and Lakes/Instruments and observation techniques*. <https://doi.org/10.5194/hess-2017-435>

Fatichi, S., Vivoni, E.R., Ogden, F.L., Ivanov, V.Y., Mirus, B., Gochis, D., Downer, C.W., Camporese, M., Davison, J.H., Ebel, B., Jones, N., Kim, J., Mascaro, G., Niswonger, R., Restrepo, P., Rigon, R., Shen, C., Sulis, M., Tarboton, D., 2016. An overview of current applications, challenges, and future trends in distributed process-based models in hydrology. *Journal of Hydrology* 537, 45–60. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2016.03.026>

Forrester, M.M., Maxwell, R.M., Bearup, L.A., Gochis, D.J., 2018. Forest Disturbance Feedbacks From Bedrock to Atmosphere Using Coupled Hydrometeorological Simulations Over the Rocky Mountain Headwaters. *J. Geophys. Res. Atmos.* 123, 9026–9046. <https://doi.org/10.1029/2018JD028380>

Foster, G.R., Huggins, L.F., Meyer, L.D., 1968. Simulation of Overland Flow on Short Field Plots. *Water Resour. Res.* 4, 1179–1187. <https://doi.org/10.1029/WR004i006p01179>

Freeze, R.A., & Cherry, J.A., 1979. *Groundwater*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 604 pp.

Freeze, R.A., 06/1972a. Role of subsurface flow in generating surface runoff: 1. Base flow contributions to channel flow. *Water Resour. Res.* 8, 609–623. <https://doi.org/10.1029/WR008i003p00609>

Freeze, R.A., 10/1972b. Role of subsurface flow in generating surface runoff: 2. Upstream source areas. *Water Resour. Res.* 8, 1272–1283. <https://doi.org/10.1029/WR008i005p01272>

Freeze, R.A., 1969. The Mechanism of Natural Ground-Water Recharge and Discharge: 1. One-dimensional, Vertical, Unsteady, Unsaturated Flow above a Recharging or Discharging Ground-Water Flow System. *Water Resour. Res.* 5, 153–171. <https://doi.org/10.1029/WR005i001p00153>

Freeze, R.A., 1971. Three-Dimensional, Transient, Saturated-Unsaturated Flow in a Groundwater Basin. *Water Resour. Res.* 7, 347–366. <https://doi.org/10.1029/WR007i002p00347>

Freeze, R.A., 1974. Streamflow generation. *Rev. Geophys.* 12, 627. <https://doi.org/10.1029/RG012i004p00627>

Freeze, R.A., 1980. A stochastic-conceptual analysis of rainfall-runoff processes on a hillslope. *Water Resour. Res.* 16, 391–408. <https://doi.org/10.1029/WR016i002p00391>

Freeze, R.A., Harlan, R.L., 1969. Blueprint for a physically-based, digitally-simulated hydrologic response model. *Journal of Hydrology* 9, 237–258. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(69\)90020-1](https://doi.org/10.1016/0022-1694(69)90020-1)

Frei, S., Fleckenstein, J.H., 2014. Representing effects of micro-topography on runoff generation and sub-surface flow patterns by using superficial rill/depression storage height variations. *Environmental Modelling & Software* 52, 5–18. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2013.10.007>

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. *Journal of Hydrology* 535, 392–406. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2016.01.073>

Gatel, L., Lauvernet, C., Carlier, N., Weill, S., Paniconi, C., 2020. Sobol Global Sensitivity Analysis of a Coupled Surface/Subsurface Water Flow and Reactive Solute Transfer Model on a Real Hillslope. *Water* 12, 121. <https://doi.org/10.3390/w12010121>

Gatel, L., Lauvernet, C., Carlier, N., Weill, S., Tournebize, J., Paniconi, C., 2019. Global evaluation and sensitivity analysis of a physically based flow and reactive transport model on a laboratory experiment. *Environmental Modelling & Software* 113, 73–83. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2018.12.006>

Gatto, B., Paniconi, C., Salandin, P., Camporese, M., 2021. Numerical dispersion of solute transport in an integrated surface–subsurface hydrological model. *Advances in Water Resources* 158, 104060. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2021.104060>

Gelhar, L.W., Gutjahr, A.L., Naff, R.L., 1979. Stochastic analysis of macrodispersion in a stratified aquifer. *Water Resour. Res.* 15, 1387–1397. <https://doi.org/10.1029/WR015i006p01387>

Germann, P.F., 1990. Macropores and hydrologic hillslope processes. In M G Anderson and T P Burt (Eds), *Process Studies in Hillslope Hydrology.*, pp.327-363. Wiley:Chichester

Germann, P.F., DiPietro, L., 1996. When is porous-media flow preferential? A hydromechanical perspective. *Geoderma* 74, 1–21. [https://doi.org/10.1016/S0016-7061\(96\)00059-6](https://doi.org/10.1016/S0016-7061(96)00059-6)

Goderniaux, P., Brouyère, S., Fowler, H.J., Blenkinsop, S., Therrien, R., Orban, P., Dassargues, A., 2009a. Large scale surface–subsurface hydrological model to assess climate change impacts on groundwater reserves. *Journal of Hydrology* 373, 122–138. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2009.04.017>

Goderniaux, P., Brouyère, S., Fowler, H.J., Blenkinsop, S., Therrien, R., Orban, P., Dassargues, A., 2009b. Large scale surface–subsurface hydrological model to assess climate change impacts on groundwater reserves. *Journal of Hydrology* 373, 122–138. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2009.04.017>

Graf, T., Therrien, R., 2005. Variable-density groundwater flow and solute transport in porous media containing nonuniform discrete fractures. *Advances in Water Resources* 28, 1351–1367. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2005.04.011>

Gupta, H.V., Kling, H., Yilmaz, K.K., Martinez, G.F., 2009a. Decomposition of the mean squared error and NSE performance criteria: Implications for improving hydrological modelling. *Journal of Hydrology* 377, 80–91. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2009.08.003>

Gupta, H.V., Kling, H., Yilmaz, K.K., Martinez, G.F., 2009b. Decomposition of the mean squared error and NSE performance criteria: Implications for improving hydrological modelling. *Journal of Hydrology* 377, 80–91. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2009.08.003>

Haan, C.T., Johnson, H.P. and Brakensiek, D.L., 1982. Hydrologic modeling of small watersheds.

Hanks, R.J., Klute, A., Bresler, E., 1969a. A numeric method for estimating infiltration, redistribution, drainage, and evaporation of water from soil. *Water Resour. Res.* 5, 1064–1069. <https://doi.org/10.1029/WR005i005p01064>

Hanks, R.J., Klute, A., Bresler, E., 1969b. A numeric method for estimating infiltration, redistribution, drainage, and evaporation of water from soil. *Water Resour. Res.* 5, 1064–1069. <https://doi.org/10.1029/WR005i005p01064>

Haverkamp, R., Vauclin, M., 1979. A note on estimating finite difference interblock hydraulic conductivity values for transient unsaturated flow problems. *Water Resour. Res.* 15, 181–187. <https://doi.org/10.1029/WR015i001p00181>

Hazenber, P., Broxton, P., Gochis, D., Niu, G.-Y., Pangle, L.A., Pelletier, J.D., Troch, P.A., Zeng, X., 2016. Testing the hybrid-3-D hillslope hydrological model in a controlled environment: Controlled testing of the h3d hillslope model. *Water Resour. Res.* 52, 1089–1107. <https://doi.org/10.1002/2015WR018106>

Heppner, C.S., Loague, K., VanderKwaak, J.E., 2007. Long-term InHM simulations of hydrologic response and sediment transport for the R-5 catchment. *Earth Surf. Process. Landforms* 32, 1273–1292. <https://doi.org/10.1002/esp.1474>

Heppner, C.S., Ran, Q., VanderKwaak, J.E., Loague, K., 2006. Adding sediment transport to the integrated hydrology model (InHM): Development and testing. *Advances in Water Resources* 29, 930–943. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2005.08.003>

Herouin, E., 1991. Modélisation des écoulements complexes à surface libre en milieu naturel. Rapport de DEA de Mécanique des Fluides, Université Claude Bernard (Lyon1).

Hewlett, J.D. and Hibbert, A.R., 1967. Factors Affecting the Response of Small Watersheds to Precipitation in Humid Areas. In: Sopper, W.E. and Lull, H.W., Eds., *Proceedings of the International Symposium on Forest Hydrology*, Pergamon, Pennsylvania State University, New York, 275-290.

Hilberts, A.G.J., Troch, P.A., Paniconi, C., Boll, J., 2007. Low-dimensional modeling of hillslope subsurface flow: Relationship between rainfall, recharge, and unsaturated storage

dynamics: Modeling of hillslope subsurface flow. *Water Resour. Res.* 43. <https://doi.org/10.1029/2006WR004964>

Horton, R.E., 1933. The Rôle of infiltration in the hydrologic cycle. *Trans. AGU* 14, 446. <https://doi.org/10.1029/TR014i001p00446>

Hoteit, H., Ackerer, Ph., 2004. TRACES: USER'S GUIDE V 1.20.

Hrachowitz, M., Clark, M.P., 2017. HESS Opinions: The complementary merits of competing modelling philosophies in hydrology. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 21, 3953–3973. <https://doi.org/10.5194/hess-21-3953-2017>

Hwang, H.-T., Frey, S.K., Park, Y.-J., Pintar, K.D.M., Lapen, D.R., Thomas, J.L., Spoelstra, J., Schiff, S.L., Brown, S.J., Sudicky, E.A., 06/2019b. Estimating cumulative wastewater treatment plant discharge influences on acesulfame and *Escherichia coli* in a highly impacted watershed with a fully-integrated modelling approach. *Water Research* 157, 647–662. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2019.03.041>

Hwang, H.-T., Park, Y.-J., Frey, S.K., Callaghan, M.V., Berg, S.J., Lapen, D.R., Sudicky, E.A., 2019. Efficient numerical incorporation of water management operations in integrated hydrosystem models: Application to tile drainage and reservoir operating systems. *Journal of Hydrology* 575, 1253–1266. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2019.03.098>

Hwang, H.-T., Park, Y.-J., Frey, S.K., Callaghan, M.V., Berg, S.J., Lapen, D.R., Sudicky, E.A., 08/2019a. Efficient numerical incorporation of water management operations in integrated hydrosystem models: Application to tile drainage and reservoir operating systems. *Journal of Hydrology* 575, 1253–1266. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2019.03.098>

Ippisch, O., Vogel, H.-J., Bastian, P., 2006. Validity limits for the van Genuchten–Mualem model and implications for parameter estimation and numerical simulation. *Advances in Water Resources* 29, 1780–1789. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2005.12.011>

Ivanov, V.Y., Vivoni, E.R., Bras, R.L., Entekhabi, D., 2004. Catchment hydrologic response with a fully distributed triangulated irregular network model: Catchment hydrologic response with a tin. *Water Resour. Res.* 40. <https://doi.org/10.1029/2004WR003218>

Jacques, D., Šimůnek, J., Mallants, D., van Genuchten, M.Th., 2006. Operator-splitting errors in coupled reactive transport codes for transient variably saturated flow and contaminant transport in layered soil profiles. *Journal of Contaminant Hydrology* 88, 197–218. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2006.06.008>

Jeannot, B., Weill, S., Eschbach, D., Schmitt, L., Delay, F., 2019. Assessing the effect of flood restoration on surface–subsurface interactions in Rohrschollen Island (Upper Rhine river – France) using integrated hydrological modeling and thermal infrared imaging. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 23, 239–254. <https://doi.org/10.5194/hess-23-239-2019>

Jeannot, B., Weill, S., Eschbach, D., Schmitt, L., Delay, F., 2018. A low-dimensional integrated subsurface hydrological model coupled with 2-D overland flow: Application to a restored fluvial hydrosystem (Upper Rhine River – France). *Journal of Hydrology* 563, 495–509. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2018.06.028>

Jones, J.P., Sudicky, E.A., Brookfield, A.E., Park, Y.-J., 2006. An assessment of the tracer-based approach to quantifying groundwater contributions to streamflow: Quantifying groundwater contributions to streamflow. *Water Resour. Res.* 42. <https://doi.org/10.1029/2005WR004130>

Jones, J.P., Sudicky, E.A., McLaren, R.G., 2008. Application of a fully-integrated surface-subsurface flow model at the watershed-scale: A case study: Integrated surface-subsurface flow model. *Water Resour. Res.* 44. <https://doi.org/10.1029/2006WR005603>

Kalbus, E., Reinstorf, F., Schirmer, M., 2006. Measuring methods for groundwater – surface water interactions: a review. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 10, 873–887. <https://doi.org/10.5194/hess-10-873-2006>

Kiely, G., 1997. *Environmental Engineering*. McGraw Hill Publishers, New York, 979

Kirchner, J.W., 2003. A double paradox in catchment hydrology and geochemistry. *Hydrol. Process.* 17, 871–874. <https://doi.org/10.1002/hyp.5108>

Kitanidis, P.K., Lane, R.W., 1985. Maximum likelihood parameter estimation of hydrologic spatial processes by the Gauss-Newton method. *Journal of Hydrology* 79, 53–71. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(85\)90181-7](https://doi.org/10.1016/0022-1694(85)90181-7)

Kollet, S.J., Maxwell, R.M., 2006. Integrated surface–groundwater flow modeling: A free-surface overland flow boundary condition in a parallel groundwater flow model. *Advances in Water Resources* 29, 945–958. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2005.08.006>

Kollet, S.J., Maxwell, R.M., 2008. Capturing the influence of groundwater dynamics on land surface processes using an integrated, distributed watershed model: Influence of groundwater dynamics on land. *Water Resour. Res.* 44. <https://doi.org/10.1029/2007WR006004>

Kollet, S.J., Zlotnik, V.A., 2003. Stream depletion predictions using pumping test data from a heterogeneous stream–aquifer system (a case study from the Great Plains, USA). *Journal of Hydrology* 281, 96–114. [https://doi.org/10.1016/S0022-1694\(03\)00203-8](https://doi.org/10.1016/S0022-1694(03)00203-8)

Kong, J., Shen, C., Luo, Z., Hua, G., Zhao, H., 2016. Improvement of the hillslope-storage Boussinesq model by considering lateral flow in the unsaturated zone: Influence of unsaturated lateral flow on hillslope drainage. *Water Resour. Res.* 52, 2965–2984. <https://doi.org/10.1002/2015WR018054>

Kool, J.B., Parker, J.C., van Genuchten, M.Th., 1987. Parameter estimation for unsaturated flow and transport models — A review. *Journal of Hydrology* 91, 255–293. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(87\)90207-1](https://doi.org/10.1016/0022-1694(87)90207-1)

Lagneau, V., van der Lee, J., 2010. Operator-splitting-based reactive transport models in strong feedback of porosity change: The contribution of analytical solutions for accuracy validation and estimator improvement. *Journal of Contaminant Hydrology* 112, 118–129. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2009.11.005>

Landau, L.D. and Lifshitz, E.M., 1960. *Mechanics*. Pergamon Press Ltd., London.

Lehmann, F., Ackerer, Ph., 1998. Comparison of Iterative Methods for Improved Solutions of the Fluid Flow Equation in Partially Saturated Porous Media. *Transport in Porous Media* 31, 275–292. <https://doi.org/10.1023/A:1006555107450>

Li, L., 2019. Watershed Reactive Transport. *Reviews in Mineralogy and Geochemistry* 85, 381–418. <https://doi.org/10.2138/rmg.2018.85.13>

Li, L., Bao, C., Sullivan, P.L., Brantley, S., Shi, Y., Duffy, C., 2017a. Understanding watershed hydrogeochemistry: 2. Synchronized hydrological and geochemical processes drive stream chemostatic behavior: Concentration-discharge relationship. *Water Resour. Res.* 53, 2346–2367. <https://doi.org/10.1002/2016WR018935>

Li, L., Bao, C., Sullivan, P.L., Brantley, S., Shi, Y., Duffy, C., 2017b. Understanding watershed hydrogeochemistry: 2. Synchronized hydrological and geochemical processes drive stream chemostatic behavior: Concentration-discharge relationship. *Water Resour. Res.* 53, 2346–2367. <https://doi.org/10.1002/2016WR018935>

Li, Q., Unger, A.J.A., Sudicky, E.A., Kassenaar, D., Wexler, E.J., Shikaze, S., 2008. Simulating the multi-seasonal response of a large-scale watershed with a 3D physically-based hydrologic model. *Journal of Hydrology* 357, 317–336. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2008.05.024>

Li, S., Duffy, C.J., 2011. Fully coupled approach to modeling shallow water flow, sediment transport, and bed evolution in rivers: Shallow water flow and sediment transport in rivers. *Water Resour. Res.* 47. <https://doi.org/10.1029/2010WR009751>

Liggett, J.E., Knowling, M.J., Werner, A.D., Simmons, C.T., 2013. On the implementation of the surface conductance approach using a block-centred surface–subsurface hydrology model. *Journal of Hydrology* 496, 1–8. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2013.05.008>

Liggett, J.E., Partington, D., Frei, S., Werner, A.D., Simmons, C.T., Fleckenstein, J.H., 2015. An exploration of coupled surface–subsurface solute transport in a fully integrated catchment model. *Journal of Hydrology* 529, 969–979. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2015.09.006>

Liggett, J.E., Werner, A.D., Smerdon, B.D., Partington, D., Simmons, C.T., 2014. Fully integrated modeling of surface-subsurface solute transport and the effect of dispersion in tracer hydrograph separation. *Water Resour. Res.* 50, 7750–7765. <https://doi.org/10.1002/2013WR015040>

Loague, K., Heppner, C.S., Abrams, R.H., Carr, A.E., VanderKwaak, J.E., Ebel, B.A., 2005. Further testing of the Integrated Hydrology Model (InHM): Event-based simulations for a small rangeland catchment located near Chickasha, Oklahoma. *Hydrol. Process.* 19, 1373–1398. <https://doi.org/10.1002/hyp.5566>

Loague, K.M., 1988. Impact of rainfall and soil hydraulic property information on runoff predictions at the hillslope scale. *Water Resour. Res.* 24, 1501–1510. <https://doi.org/10.1029/WR024i009p01501>

Maina, F.Z., Siirila-Woodburn, E.R., 2020. Watersheds dynamics following wildfires: Nonlinear feedbacks and implications on hydrologic responses. *Hydrological Processes* 34, 33–50. <https://doi.org/10.1002/hyp.13568>

Marsily GD., 1981. *Hydrogéologie quantitative*. Collection Sciences de la terre.

Martin JL, McCutcheon SC., 1999. *Hydrodynamics and transport for water quality modeling*. CRC Press, Boca Rotan

Maxwell, J.C., 1873. *A treatise on electricity and magnetism*. volume 1. Oxford: Clarendon Press.

Maxwell, R.M., Condon, L.E., Kollet, S.J., 2015. A high-resolution simulation of groundwater and surface water over most of the continental US with the integrated hydrologic model ParFlow v3. *Geosci. Model Dev.* 8, 923–937. <https://doi.org/10.5194/gmd-8-923-2015>

Maxwell, R.M., Lundquist, J.K., Mirocha, J.D., Smith, S.G., Woodward, C.S., Tompson, A.F.B., 2011. Development of a Coupled Groundwater–Atmosphere Model. *Monthly Weather Review* 139, 96–116. <https://doi.org/10.1175/2010MWR3392.1>

Maxwell, R.M., Miller, N.L., 2005. Development of a Coupled Land Surface and Groundwater Model. *Journal of Hydrometeorology* 6, 233–247. <https://doi.org/10.1175/JHM422.1>

Maxwell, R.M., Putti, M., Meyerhoff, S., Delfs, J., Ferguson, I.M., Ivanov, V., Kim, J., Kolditz, O., Kollet, S.J., Kumar, M., Lopez, S., Niu, J., Paniconi, C., Park, Y., Phanikumar, M.S., Shen, C., Sudicky, E.A., Sulis, M., 2014. Surface-subsurface model intercomparison: A

first set of benchmark results to diagnose integrated hydrology and feedbacks. *Water Resour. Res.* 50, 1531–1549. <https://doi.org/10.1002/2013WR013725>

Mazzia, A., Putti, M., 2005. High order Godunov mixed methods on tetrahedral meshes for density driven flow simulations in porous media. *Journal of Computational Physics* 208, 154–174. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.01.029>

McDonnell, J.J., 1990. A Rationale for Old Water Discharge Through Macropores in a Steep, Humid Catchment. *Water Resour. Res.* 26, 2821–2832. <https://doi.org/10.1029/WR026i011p02821>

McDonnell, J.J., 2009. Hewlett, J.D. and Hibbert, A.R. 1967: Factors affecting the response of small watersheds to precipitation in humid areas. In Sopper, W.E. and Lull, H.W., editors, *Forest hydrology*, New York: Pergamon Press, 275—90. *Progress in Physical Geography: Earth and Environment* 33, 288–293. <https://doi.org/10.1177/0309133309338118>

Mirus, B.B., Ebel, B.A., Loague, K., Wemple, B.C., 2007. Simulated effect of a forest road on near-surface hydrologic response: redux. *Earth Surf. Process. Landforms* 32, 126–142. <https://doi.org/10.1002/esp.1387>

Mirus, B.B., Loague, K., VanderKwaak, J.E., Kampf, S.K., Burges, S.J., 2009. A hypothetical reality of Tarrawarra-like hydrologic response. *Hydrol. Process.* 23, 1093–1103. <https://doi.org/10.1002/hyp.7241>

Morel-Seytoux, H.J., 1989. *Unsaturated flow in hydrologic modeling. Theory and practice.*

Mosley, M.P., 1979. Streamflow generation in a forested watershed, New Zealand. *Water Resour. Res.* 15, 795–806. <https://doi.org/10.1029/WR015i004p00795>

Narasimhan, T.N., 2004. Darcy's Law and Unsaturated Flow. *Vadose Zone Journal* 3, 1059–1059. <https://doi.org/10.2136/vzj2004.1059>

Narasimhan, T.N., 2006. On Storage Coefficient and Vertical Strain. *Ground Water* 44, 488–491. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2006.00160.x>

Neuman, S.P., Winter, C.L., Newman, C.M., 1987. Stochastic theory of field-scale fickian dispersion in anisotropic porous media. *Water Resour. Res.* 23, 453–466. <https://doi.org/10.1029/WR023i003p00453>

Neuman, S.P., Witherspoon, P.A., 1970. Finite Element Method of Analyzing Steady Seepage with a Free Surface. *Water Resour. Res.* 6, 889–897. <https://doi.org/10.1029/WR006i003p00889>

Niu, J., Phanikumar, M.S., 2015. Modeling watershed-scale solute transport using an integrated, process-based hydrologic model with applications to bacterial fate and transport. *Journal of Hydrology* 529, 35–48. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2015.07.013>

Orlandini, S., Rosso, R., 1996. Diffusion Wave Modeling of Distributed Catchment Dynamics. *J. Hydrol. Eng.* 1, 103–113. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)1084-0699\(1996\)1:3\(103\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)1084-0699(1996)1:3(103))

Pan, Y., Weill, S., Ackerer, P., Delay, F., 2015. A coupled stream flow and depth-integrated subsurface flow model for catchment hydrology. *Journal of Hydrology* 530, 66–78. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2015.09.044>

Panday, S., Huyakorn, P.S., 2004. A fully coupled physically-based spatially-distributed model for evaluating surface/subsurface flow. *Advances in Water Resources* 27, 361–382. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2004.02.016>

Paniconi, C., Putti, M., 1994. A comparison of Picard and Newton iteration in the numerical solution of multidimensional variably saturated flow problems. *Water Resour. Res.* 30, 3357–3374. <https://doi.org/10.1029/94WR02046>

Paniconi, C., Putti, M., 2015. Physically based modeling in catchment hydrology at 50: Survey and outlook. *Water Resour. Res.* 51, 7090–7129. <https://doi.org/10.1002/2015WR017780>

Pilgrim, D.H., Huff, D.D., Steele, T.D., 1978. A field evaluation of subsurface and surface runoff. *Journal of Hydrology* 38, 319–341. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(78\)90077-X](https://doi.org/10.1016/0022-1694(78)90077-X)

Pinder, G.F., Bredehoeft, J.D., 1968. Application of the Digital Computer for Aquifer Evaluation. *Water Resour. Res.* 4, 1069–1093. <https://doi.org/10.1029/WR004i005p01069>

Pozdniakov, S., Tsang, C.-F., 2004. A self-consistent approach for calculating the effective hydraulic conductivity of a binary, heterogeneous medium: Self-consistent conductivity of a binary medium. *Water Resour. Res.* 40. <https://doi.org/10.1029/2003WR002617>

Qu, Y., Duffy, C.J., 2007. A semidiscrete finite volume formulation for multiprocess watershed simulation: Multiprocess watershed simulation. *Water Resour. Res.* 43. <https://doi.org/10.1029/2006WR005752>

Ran, Q., Heppner, C.S., VanderKwaak, J.E., Loague, K., 2007. Further testing of the integrated hydrology model (InHM): multiple-species sediment transport. *Hydrol. Process.* 21, 1522–1531. <https://doi.org/10.1002/hyp.6642>

Raviart, P.A. & Thomas, J.M., 1977. A mixed finite element method for the second order elliptic problem. In : *Mathematical Aspects of the Finite Element Method*, Springer Verlag, New York

Refsgaard, J. C., & Storm, B., 1996. Construction, Calibration, and Validation of Hydrological Models. In M. B. Abbot, & J. C. Refsgaard (Eds.), *Distributed Hydrologic Modeling* (pp. 41-54). Springer.

Ren, Z., Xu, C., Lu, T., Singer, M.A., 2014. Dynamic adaptive chemistry with operator splitting schemes for reactive flow simulations. *Journal of Computational Physics* 263, 19–36. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.01.016>

Romano, A.J., Shirron, J.J., Bucaro, J.A., 1998. On the noninvasive determination of material parameters from a knowledge of elastic displacements theory and numerical simulation. *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect., Freq. Contr.* 45, 751–759. <https://doi.org/10.1109/58.677725>

Ross, P.J., 1990. Efficient numerical methods for infiltration using Richards' equation. *Water Resour. Res.* 26, 279–290. <https://doi.org/10.1029/WR026i002p00279>

Rubin J., 1969. Numerical analysis of ponded rainfall infiltration. Proceedings of the Wageningen Symposium, Int. Ass. Scien. Hydrol

Rubin, Y., 1995. Flow and Transport in Bimodal Heterogeneous Formations. *Water Resour. Res.* 31, 2461–2468. <https://doi.org/10.1029/95WR01953>

Shen, C., Phanikumar, M.S., 2010. A process-based, distributed hydrologic model based on a large-scale method for surface–subsurface coupling. *Advances in Water Resources* 33, 1524–1541. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2010.09.002>

Shi, Y., Eissenstat, D.M., He, Y., Davis, K.J., 2018. Using a spatially-distributed hydrologic biogeochemistry model with a nitrogen transport module to study the spatial variation of carbon processes in a Critical Zone Observatory. *Ecological Modelling* 380, 8–21. <https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2018.04.007>

Shrestha, P., Sulis, M., Masbou, M., Kollet, S., Simmer, C., 2014. A Scale-Consistent Terrestrial Systems Modeling Platform Based on COSMO, CLM, and ParFlow. *Mon. Wea. Rev.* 142, 3466–3483. <https://doi.org/10.1175/MWR-D-14-00029.1>

Shvidler, M.I., 1985. Averaging transfer equations in porous media with random inhomogeneities. *Fluid Dyn* 20, 59–65. <https://doi.org/10.1007/BF01097362>

Simmons, C.T., Brunner, P., Therrien, R., Sudicky, E.A., 2020. Commemorating the 50th anniversary of the Freeze and Harlan (1969) Blueprint for a physically-based, digitally-simulated hydrologic response model. *Journal of Hydrology* 584, 124309. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2019.124309>

Singh, V.P., 1997. Effect of spatial and temporal variability in rainfall and watershed characteristics on stream flow hydrograph. *Hydrol. Process.*, 11: 1649-1669.

Singh, V.P., Woolhiser, D.A., 2002. Mathematical Modeling of Watershed Hydrology. *J. Hydrol. Eng.* 7, 270–292. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)1084-0699\(2002\)7:4\(270\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)1084-0699(2002)7:4(270))

Sklash, M.G., Farvolden, R.N., 1979. The role of groundwater in storm runoff. *Journal of Hydrology* 43, 45–65. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(79\)90164-1](https://doi.org/10.1016/0022-1694(79)90164-1)

Sloan, W.T., 2000a. A physics-based function for modeling transient groundwater discharge at the watershed scale. *Water Resour. Res.* 36, 225–241. <https://doi.org/10.1029/1999WR900221>

Sloan, W.T., 2000b. A physics-based function for modeling transient groundwater discharge at the watershed scale. *Water Resour. Res.* 36, 225–241. <https://doi.org/10.1029/1999WR900221>

Smith, R.E., Woolhiser, D.A., 1971. Overland Flow on an Infiltrating Surface. *Water Resour. Res.* 7, 899–913. <https://doi.org/10.1029/WR007i004p00899>

Strelkoff, T.S., 1969. One-Dimensional Equations of Open-Channel Flow. *J. Hydr. Div.* 95, 861–876. <https://doi.org/10.1061/JYCEAJ.0002105>

Sulis, M., Paniconi, C., Rivard, C., Harvey, R., Chaumont, D., 2011. Assessment of climate change impacts at the catchment scale with a detailed hydrological model of surface-subsurface interactions and comparison with a land surface model: Assessment of climate change impacts. *Water Resour. Res.* 47. <https://doi.org/10.1029/2010WR009167>

Szymkiewicz, A., Helmig, R., 2011. Comparison of conductivity averaging methods for one-dimensional unsaturated flow in layered soils. *Advances in Water Resources* 34, 1012–1025. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2011.05.011>

Taylor, G.I., 1953. Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube. *Proc. R. Soc. Lond. A* 219, 186–203. <https://doi.org/10.1098/rspa.1953.0139>

Therrien R, McLaren R, Sudicky E, Panday S, 2005. HydroGeoSphere: A three-dimensional numerical model describing fully-integrated subsurface and surface flow and solute transport, Technical report, Groundwater Simulations Group, University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada, pp 322.

Therrien R, Sudicky EA, McLaren RG., 2003. FRAC3DVS: An efficient simulator for three-dimensional, saturated-unsaturated groundwater flow and density dependent, chain-decay solute transport in porous, discretely-fractured porous or dual-porosity formations, User's guide. p. 146

Therrien, R., McLaren, R.G., Sudicky, E.A., Panday, S.M., 2009. HydroGeoSphere: a three-dimensional numerical model describing fully-integrated subsurface and surface flow and solute transport. *Groundw. Simul. Group Univ. Waterloo Waterloo ON*.

Tocci, M.D., Kelley, C.T., Miller, C.T., 1997. Accurate and economical solution of the pressure-head form of Richards' equation by the method of lines. *Advances in Water Resources* 20, 1–14. [https://doi.org/10.1016/S0309-1708\(96\)00008-5](https://doi.org/10.1016/S0309-1708(96)00008-5)

Toro, E.F., 2009. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/b79761>

Troch, P.A., Paniconi, C., Emiel van Loon, E., 2003. Hillslope-storage Boussinesq model for subsurface flow and variable source areas along complex hillslopes: 1. Formulation and characteristic response: Hillslope-storage boussinesq model, 1. *Water Resour. Res.* 39. <https://doi.org/10.1029/2002WR001728>

Valerio, A., Rajaram, H., Zagana, E., 2010. Incorporating Groundwater-Surface Water Interaction into River Management Models. *Ground Water* 48, 661–673. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2010.00702.x>

van Genuchten, M.Th., 1980. A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Science Society of America Journal* 44, 892–898. <https://doi.org/10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x>

VanderKwaak, J.E., Loague, K., 2001. Hydrologic-Response simulations for the R-5 catchment with a comprehensive physics-based model. *Water Resour. Res.* 37, 999–1013. <https://doi.org/10.1029/2000WR900272>

Vogel, T., van Genuchten, M.Th., Cislerova, M., 2001. Effect of the shape of the soil hydraulic functions near saturation on variably-saturated flow predictions. *Advances in Water Resources* 24, 133–144. [https://doi.org/10.1016/S0309-1708\(00\)00037-3](https://doi.org/10.1016/S0309-1708(00)00037-3)

Wallach, R., Grigorin, G., Rivlin (Byk), J., 2001. A comprehensive mathematical model for transport of soil-dissolved chemicals by overland flow. *Journal of Hydrology* 247, 85–99. [https://doi.org/10.1016/S0022-1694\(01\)00365-1](https://doi.org/10.1016/S0022-1694(01)00365-1)

Weill, S., Altissimo, M., Cassiani, G., Deiana, R., Marani, M., Putti, M., 2013. Saturated area dynamics and streamflow generation from coupled surface–subsurface simulations and field observations. *Advances in Water Resources* 59, 196–208. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2013.06.007>

Weill, S., Delay, F., Pan, Y., Ackerer, P., 2017. A low-dimensional subsurface model for saturated and unsaturated flow processes: ability to address heterogeneity. *Comput Geosci* 21, 301–314. <https://doi.org/10.1007/s10596-017-9613-8>

Weill, S., Lesparre, N., Jeannot, B., Delay, F., 2019. Variability of Water Transit Time Distributions at the Strengbach Catchment (Vosges Mountains, France) Inferred Through Integrated Hydrological Modeling and Particle Tracking Algorithms. *Water* 11, 2637. <https://doi.org/10.3390/w11122637>

Weill, S., Mazzia, A., Putti, M., Paniconi, C., 2011. Coupling water flow and solute transport into a physically-based surface–subsurface hydrological model. *Advances in Water Resources* 34, 128–136. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2010.10.001>

Weill, S., Mouche, E., Patin, J., 2009. A generalized Richards equation for surface/subsurface flow modelling. *Journal of Hydrology* 366, 9–20. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2008.12.007>

Werner, A.D., Gallagher, M.R., Weeks, S.W., 2006. Regional-scale, fully coupled modelling of stream–aquifer interaction in a tropical catchment. *Journal of Hydrology* 328, 497–510. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2005.12.034>

Weyman, D.R., 1970. Throughflow on hillslopes and its relation to the stream hydrograph. *International Association of Scientific Hydrology. Bulletin* 15, 25–33. <https://doi.org/10.1080/02626667009493969>

Whipkey, R.Z., 1965. Subsurface stormflow from forested slopes. *International Association of Scientific Hydrology. Bulletin* 10, 74–85. <https://doi.org/10.1080/02626666509493392>

Whipkey, R.Z., 1969. Storm runoff from forested catchments by subsurface routes. In: *Floods and their Computation (Proc. Leningrad Symp., August 1969)*, 773-779. IAHS Publ. no. 85

Williams, G.A., Miller, C.T., 1999. An evaluation of temporally adaptive transformation approaches for solving Richards' equation. *Advances in Water Resources* 22, 831–840. [https://doi.org/10.1016/S0309-1708\(98\)00048-7](https://doi.org/10.1016/S0309-1708(98)00048-7)

Wooding, R.A., 1965. A hydraulic model for the catchment-stream problem. *Journal of Hydrology* 3, 254–267. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(65\)90084-3](https://doi.org/10.1016/0022-1694(65)90084-3)

Woolhiser, D.A., Liggett, J.A., 1967. Unsteady, one-dimensional flow over a plane-The rising hydrograph. *Water Resour. Res.* 3, 753–771. <https://doi.org/10.1029/WR003i003p00753>

Yang, Y.-F., Chen, P.-J., Liao, V.H.-C., 05/2016a. Nanoscale zerovalent iron (nZVI) at environmentally relevant concentrations induced multigenerational reproductive toxicity in *Caenorhabditis elegans*. *Chemosphere* 150, 615–623. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2016.01.068>

Yang, Y.-F., Cheng, Y.-H., Liao, C.-M., 11/2016b. In situ remediation-released zero-valent iron nanoparticles impair soil ecosystems health: A *C. elegans* biomarker-based risk assessment. *Journal of Hazardous Materials* 317, 210–220. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2016.05.070>

Zhang, H., Trepanier, J., Reggio, M., Camarero, R., 1992. A Navier-Stokes solver for stretched triangular grids, in: 30th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Presented at the 30th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Reno,NV,U.S.A. <https://doi.org/10.2514/6.1992-183>

Zheng, C. and Bennett, G.D., 2002. *Applied contaminant transport modeling (Vol. 2, p. 353)*. New York: Wiley-Interscience.

Zheng, C., Bennett, G.D., 2002. *Applied contaminant transport modeling, 2nd Edition*. Wiley J. & Sons, Inc. ISBN: 978-0-471-38477-9, 656 p.

Zhi, W., Li, L., Dong, W., Brown, W., Kaye, J., Steefel, C., Williams, K.H., 2019. Distinct Source Water Chemistry Shapes Contrasting Concentration-Discharge Patterns. *Water Resour. Res.* 55, 4233–4251. <https://doi.org/10.1029/2018WR024257>

Résumé en français suivi des mots-clés en français

Les modèles de transport de soluté sont généralement basés sur la résolution de l'équation d'advection-dispersion 3-D et sont fréquemment confrontés à plusieurs problèmes numériques, en plus d'un coût calcul élevé. Le modèle hydrologique NIHM (Normally Integrated Hydrological Model) a été récemment développé pour reproduire les réponses hydrologiques des bassins versants et se caractérise par un modèle souterrain dit à dimension réduite 2-D couplé à un écoulement de surface 2-D et à un écoulement en chenaux 1-D. La faible dimensionnalité dans le compartiment souterrain est le résultat d'une intégration le long de la direction locale normale au substratum de l'aquifère, ce qui permet de réduire significativement le nombre de paramètres requis pour réaliser les simulations, et par conséquent de gagner énormément en temps de calcul. Dans la présente étude, une implémentation numérique du transport dans les fonctionnalités du modèle NIHM a été réalisée de manière non intrusive, en tenant compte des interactions à l'interface surface-subsurface. Le modèle NIHM a été déjà évalué et appliqué à des hydrosystèmes réels, mais sans aborder les transferts de masse. La précision et l'efficacité du modèle proposé ont été soigneusement examinées à travers divers cas tests synthétiques sous différentes conditions hydrodynamiques, afin d'évaluer l'influence de la réduction de la dimensionnalité sur les simulations de transport de soluté. Les résultats montrent que la réduction de dimension reste adaptée à la prédiction des comportements de transport de solutés dans les systèmes peu profonds tout en offrant un gain important en temps de calcul. Cela pourrait être prometteur pour diverses applications traitant de la qualité des eaux souterraines.

Mots clés :

Transport de soluté
Modèle à dimension réduite
Modèle à base physique
Équation d'advection-dispersion
Processus de transport
Interactions surface-subsurface

Résumé en anglais suivi des mots-clés en anglais

Solute transport models based on the resolution of the 3-D Advection-Dispersion equation (ADE) are frequently plagued by several numerical problems, which add to the high computational cost. The hydrological model NIHM (Normally Integrated Hydrological Model) was recently proposed as a tool simulating the hydrological responses of watersheds with shallow saturated aquifers by coupling surface flow and a low-dimensional sub-surface system, including the vadose zone. In this study, we couple the low-dimensional flow model NIHM with a transport module solving the ADE to propose an approach that enables to reduce the dimensionality of both the flow and transport problems. In NIHM, the low-dimensionality in the subsurface compartment results from an integration along the local direction normal to the bedrock of the aquifer. NIHM was previously evaluated and applied to actual hydrosystems—without addressing mass transfers—and it showed its ability to capture various hydrological responses even from complex systems. However, the relevance of a low-

dimensional approach to transport is not proven yet as the model reduction could also render approximated velocity fields inappropriate to mass transfer problems. The accuracy and computational efficiency of the proposed model have been thoroughly examined through various synthetic test cases under different hydrodynamic conditions to assess the influence of the reduction of dimensionality on solute transport simulations. The findings of this study demonstrate that the reduction of dimension remains suited to predicting solute transport behaviors in shallow subsurface systems while providing an important gain in computation time. This might be promising for various applications dealing with groundwater quality.

Keywords :

Solute transport

Model reduction

Low-dimensional model

Physically-based modeling

Advection–dispersion equation

Transport scheme

Surface-Subsurface interactions